况蕙孙　白铭复　编著

物理学中的群论方法

○上册○

WULI XUEZHONGDE QUNLUNFANGFA

国防科技大学出版社

W

物理学中的群论方法

统一书号 15415·
定　价 1.40



物理学中的群论方法

·上　册·

况蕙孙　白铭复　编著

国防科技大学出版社

内容介绍

本书系统地讲述群论及群表示论的基本内容，着重讨论了有限群的表示，李群李代数的基本理论，半单李群李代数的分类和表示问题，群论与量子力学的关系，以及运用群论原理处理物理学中的对称性问题的一般方法。对于物理学中的常见群，如分子点群、晶体点群、空间群、旋转群、洛仑兹群、幺正群等都作了详细的描述，对它们的结构和表示给出了简洁而严谨的论证与推演。

本书在陈述方式、证明方法和材料组织等方面兼顾了数学的严谨性与便于具有相当于大学物理专业高年级学生的数理基础的非数学专业读者的阅读两个方面的要求，在取材方面，同时照顾了分子原子物理、固体物理、核物理、粒子物理等专业的读者对群论知识的共同和特殊的需要。

全书分上、下两册。上册包括对物理学中常见群的描述与推导，群论和群表示论基础，有限群的表示理论；下册包括李群李代数的表示理论，置换群的表示，空间群的表示，群论与量子力学的关系（应用）。

本书可作为高等学校物理和化学方面有关专业的高年级本科生以及研究生的群论课教材或参考书，也可供物理、化学、数学工作者或教师参考。

物理学中的群论方法

·上　册·

况蕙孙　白铭复　编著

责任编辑　马立群

封面设计　侯　云

国防科技大学出版社　出版

湖南省新华书店发行

国防科技大学印刷厂印装

开本：787×1092 $\frac{1}{32}$　印张：$6\frac{9}{16}$　字数：157,000千字

1985年12月第1版　1987年7月第2次印刷　印数：3 001-6 000册

统一书号：15415·008　定价：1.40元

序　言

群论是现代数学中概括性最强、对数学的各个领域影响最大的分支之一。在其发展过程中曾引起了许多数学大师的热忱和偏爱，Klein 认为群会把整个数学统一起来，Poincaré 也曾说过："…群论就是那摒弃其内容而化为纯粹形式的整个数学"。但这一数学理论的高度抽象的外表却阻碍了物理学家对它的理解能力。在群论方法被引入物理学（Weyl、Wigner、Neuman 等）的初期（本世纪30年代），甚至在第一流的物理学家当中也发生过反对"群灾难"的倾向(如Dirac 与 Slatar)。因而曾经存在着一种流传很广的见解，认为群论方法对于广泛的应用来说过于复杂，而所有的结果采用较简单的方法都能得到。如今已经很清楚，这种见解是不对的。事实上，群论已经成为现代物理学中最有用的数学理论之一。特别是在对称性起重要作用的领域，如原子分子物理、固体物理、原子核物理、粒子物理、量子化学等当中，伴随着知识的更新和现代化，群论方法已被越来越广泛的采用。与此相应的，这些领域内的科技工作者对于群论方法的系统知识的需求也在日益增长。目前，各高等学校的有关专业多已将群论列为高年级学生和研究生的选修或必修课。

但是，当初群论方法遭到部分物理学家抵制的根源至今并未完全消除。这就是群论相对于物理（化学）工作者的知识结构（指数理方面）来说，仍具有较高的难度。"数学的群论"已经发展成为一个结构严谨的庞大的理论体系，而其中与物理学（化学）的关系较为密切的部分往往属于这个体系的"上层

建筑”，某些上层建筑部分(例如关于李群的分类与表示问题)即使对于数学工作者（非代数专业）来说也不是都很熟悉的。因而，如何将“数学的群论”中对物理学有用的部分组织成为一个易于使物理学家接受的逻辑上完整的体系，即“物理的群论”，这显然是一个重要而困难的问题。已经有一些学者在这方面进行了努力，并写出了不少属于“物理的群论”的著述，但问题仍未能够解决得令人十分满意。

本书试图从表述方式、论证方法、材料的组织和详尽程度等方面对上述情况加以改善。

我们假定读者已经熟悉了与物理系本科生的课程深度相应的线性代数、量子力学、固体物理方面的知识。

全书分上、下两册。上册即前四章。第一章从物理体系的对称性出发引入对称群的初步概念，对分子点群、晶体点群、空间群、旋转群、置换群、洛仑兹群、幺正群进行了详细地描述和推导。第二章和第三章分别为群论和群表示论的基础，讲述了必要的基本概念和一般原理，并列举了第一章中讨论过的大量具体例子作为对较抽象的概念和原理的直观解说和简明例证。第四章是有限群的表示理论，介绍了群代数和正则表示的概念，系统地阐述了特征标理论，证明了关于既约表示矩阵元和单纯特征标的正交、完备性定理以及关于既约表示的个数和維数的定理；计算了晶体点群的既约表示和特征标；导出了利用广义投影算子来约化已知表示空间的一般方法。

下册即后四章。第五章讨论李群李代数的表示理论：首先作为导引，对 $SO(3)$ 和 $SU(2)$ 的表示作了完整而详细的讨论；关于李群和李代数的一般理论主要是按照Racah的思路进行的，但在概念的陈述和数学推演论证方面作了某些简化和相当详尽的扩充，利用根的概念讨论了半单李群李代数的分类，利用权的概念讨论了半单李群李代数的表示；关于典型群的具

体结果是作为一般理论的例子给出的，特别对于$SU(3)$、$SO(4)$、L_g的表示进行了较详细的讨论。第六章讲述群论与量子力学的关系，着重阐明将群论(群表示论)用于物理学（主要是量子力学）中的对称性问题的一般原理和方法。第七章系统地介绍置换群的表示理论，对其中的数学推演作了较为简洁的处理。第八章讲空间群的表示与晶体中的电子态。

编　者

1985年元月

目　录

序　言

第一章　物理学中的对称性与对称群

§ 1　对称性的意义与描述 …… 1

1.1　几何图形的对称性 …… 1

1.2　物理体系的对称性 …… 3

1.3　对称变换 …… 4

1.4　对称群 …… 9

1.5　破缺的对称性 …… 11

§ 2　分子的对称性与分子点群 …… 12

2.1　空间操作的基本类型 …… 12

2.2　分子的点对称性 …… 15

2.3　点操作的运算性质　点群的乘法表 …… 19

2.4　非线型分子与有限点群 …… 22

2.5　第一类（有限）点群 …… 23

2.6　第二类（有限）点群 …… 28

§ 3　晶体的对称性与晶体点群、空间群 …… 32

3.1　晶格的对称操作 …… 32

3.2　晶体点群 …… 38

3.3　格群与布喇菲格子 …… 40

3.4　晶体空间群（空间群） …… 43

§ 4　旋转对称性与旋转群 …… 48

4.1　旋转对称 …… 48

4.2　旋转群的参数化 …… 49

4.3　旋转群的矩阵表示 …… 51

4.4　旋转矩阵的指数形式 …… 52

4.5　旋转群上的不变积分 …… 55

§ 5　置换对称性与置换群 …… 59

5.1　置换群 …… 59

5.2　置换的轮换表示 …… 61

5.3　置换的循环结构 …… 62

§ 6　相对性原理与洛仑兹群……65
6.1　正常洛仑兹变换……65
6.2　正常洛仑兹群……70
6.3　全洛仑兹群与推广的洛仑兹群……73
§ 7　幺正对称与特殊幺正群……75

第二章　群论基础

§ 8　群的一般概念……84
8.1　抽象群……84
8.2　连续群……86
§ 9　群的主要子集……92
9.1　子群……92
9.2　生成元……94
9.3　类……97
9.4　不变子群……100
9.5　群的直积……101
§ 10　群的同构与同态……104
10.1　同构……104
10.2　同态……104
10.3　同态定理……107

第三章　群的表示理论

§ 11　群的线性表示……108
11.1　表示的一般定义……108
11.2　表示的等价性……112
11.3　等价酉表示的存在定理……114
§ 12　表示的可约性……115
12.1　可约表示与不可约表示……115
12.2　完全可约性定理……120
12.3　表示的约化……121
§ 13　对偶表示与乘积表示……123
13.1　对偶表示……123
13.2　乘积表示……124
13.3　不可约表示的积乘中含有单位表示的条件……126
§ 14　与群的表示可对易的算子……127
14.1　Schur引理……127
14.2　与给定表示可易的算子（矩阵）……130
14.3　直积群的表示……135
§ 15　例子——一些简单群的表示……137
15.1　循环群的表示……137
15.2　有限可换群的表示……138
15.3　置换群 S_3 与点群 C_{3v} 的表示……139

15.4 定轴转动群$SO(2)$的表示 ……142
15.5 定轴转动——反映群 $O(2)$ 的表示 ……143
15.6 点群 $D_{\infty h}=O(2)\times C_i$ 的表示……147

第四章 有限群的表示

§16 群代数与正则表示 ……149
16.1 群代数 ……149
16.2 正则表示与群代数的对称基 ……152
16.3 关于表示的个数和维数的定理 群代数的结构 ……158
§17 特征标与正交性定理 ……162
17.1 特征标 ……162
17.2 不可约表示矩阵元的正交完备性 ……163
17.3 单纯特征标的正交性关系 ……166
17.4 单纯特征标的计算 ……168
§18 特征标理论在群表示论中的应用 ……174
18.1 表示的约化与唯一性定理 ……174
18.2 表示的等价性判据 ……176
18.3 表示的可约性判据……177
18.4 关于直积群的不可约表示的构造 ……177
18.5 单纯特征标的 Wigner 和……178
§19 晶体点群的单纯特征标与不可约表示 ……182
19.1 晶体点群的同构关系 ……182
19.2 七个基础点群的单纯特征标与不可约表示 ……184
§20 表示空间的约化 ……188
20.1 表示（空间）的约化问题 ……188
20.2 对称化算子 ……190
20.3 对称基的建立 ……193
参考书目 ……197

第一章 物理学中的对称性与对称群

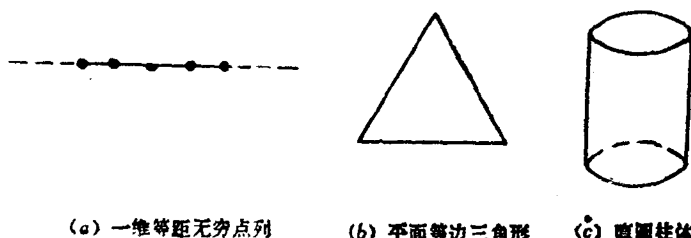
对称性是自然界的一个重要特征，它使自然规律，特别是物理规律具有和谐优美的形式。对称性对于物理过程常常提出某种严格的限制，因而具有明确的“物理效果”。在已知物理体系对称性的情况下，可以通过对它的分析来揭示其所蕴含的物理效果，从而或者完全迴避、或者以对称性所能提供的最大限度充分简化可能是高度困难的具体的数学分析，例如多体薛定谔方程的求解问题。反之，对于了解得很不充分的物理体系，如基本粒子，也可以从有限的观测数据出发去推测它应具有的对称性质，而后者一旦确立便可预言更多的物理结果。因此，对称分析的方法——即群论方法——在近代物理的许多分支中都具有重要作用。本章将讨论物理学中一些最重要的对称性，并引入描述这些对称性的数学工具——相应的对称群。

§1 对称性的意义与描述

1.1 几何图形的对称性

对称性的概念是在非常广泛的意义下使用的，但这概念的直观模型可以追溯到几何形体的对称。考察图 1.1 中的几何图形，可看到它们具有某种对称性。这里对称性一词的确切含意应该是指这些图形在某些确定的变动之下能够复原，这些变动可以是平移、转动、关于某一点的反演、关于某一平面或直线

的反映，即一切可能的空间等距变换。这种能使某一图形复原



(a) 一维等距无穷点列　(b) 平面等边三角形　(c) 直圆柱体

图 1.1

的变动，通常称为这个图形的对称操作或对称变换。

为了具体刻画出一个图形的对称性，一个直接的方法是罗列出这个图形的全部对称操作。这是对图形对称性的一种完全的描述，它具有数学的准确性。例如，图形 1.1(a) 的对称性可以准确地表述为，它的全部对称操作是{移距为点间距整数倍的移动，关于点列中的一点的反演，关于点列中任意相邻两点的中点的反演}。图形 1.1(b) 的对称性可表述为，其全部对称操作是{绕三角形的中心转角 0、$\frac{2\pi}{3}$、$\frac{4\pi}{3}$，关于每个角分线的反映}。图形 1.1(c) 的对称性可表述为，其全部对称操作是{绕圆柱的轴旋转任意角，旋转后再关于圆柱的中心反演，关于过轴线的任一平面的反映，绕过圆柱的中心且垂直于轴线的直线转角 π}。当然，为了给出一个图形的对称操作的集合，有时只指出其中的一部分操作即可，因为其余的操作可以由这一部分操作通过各种结合来生成。

另外，对于几何图形来说，还有一种更简便的描述其对称性的方法，就是指出它的全部对称元素——转轴（指明最小转角或轴次）、反演中心、反映面等等，一个对称元素关联着一

组对称操作。例如，图形 1.1(*c*) 的对称性也可以表为，其对称元素为 {一个轴次为∞，即可转任意角的轴——柱体的轴线，一个反演中心——柱体的中心，一个垂直于轴的映面，∞个通过轴的映面，∞个垂直于轴的二次转轴(最小转角为 $2\pi/2=\pi$)}。在这个例子中，实际上只需指出一部分对称元素：一个∞次轴，一个中心，∞个二次轴，其余的对称元素可由它们推出。与对称元素这一几何概念不同，对称操作或对称变换的概念可以在更广泛的意义下使用，因而能够用以描述更一般的对称性质。

1.2 物理体系的对称性

我们所关心的，是物理系统的行为在多大程度上以及如何受其对称性的支配。

首先要明确对称性的含意和描述方法。对物理体系来说，其对称性当然是与其结构相关的，狭义地说，与其几何构形相关。例如，原子具有球对称性，分子具有与其几何构形相应的对称性，晶体具有其空间点阵的几何对称性等等，但这是很片面的。

事实上许多重要的对称性并不具有直接的几何意义，例如全同粒子之间的对称性，质子和中子在核力方面所表现出的对称性等。那么，说物理体系具有某种对称性的准确含义应当是什么呢？这是指体系的运动方程在某些变换下的不变性，而这些变换则称为体系或其运动方程的对称变换。

决定物体行为的运动方程取决于相互作用（内部的和外部的），因而体系的对称性也就是相互作用的对称性，即相互作用（包括“外场”）在某些变换下的不变性。由于物体的几何构形是决定相互作用的因素之一，上述的一般概念自然将几何构形方面的对称性包含在内。这里所说的变换包括时空变换，

粒子的置换变换，以及反映粒子内部性质的正反粒子共轭变换，幺正变换，等等。

在非相对论量子力学中，经常使用外場的概念，外場的存在使体系在空间方面的对称性降低为外場的几何对称性；其次，全同粒子的置换对称性对多体问题显然是重要的。因此，这两种对称性对于原子，原子核，分子，固体等的非相对论量子理论具有突出的重要性；本书的主要篇幅正是针对这些对称性的。

1.3 对称变换

现在以空间变换和粒子的置换变换为例，说明这些变换在体系的态矢（波函数）空间中的导出形式及一个变换成为体系的对称变换的条件。

用符号 g 表示坐标空间的一个等距变换，它将点 $\boldsymbol{r}$ 搬到（变为）点 $\boldsymbol{r}'$，记为

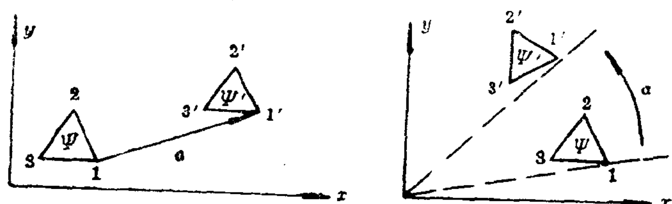
$$\boldsymbol{r}' = g\boldsymbol{r} \tag{1.1}$$

例如，当 g 分别为平移 $\boldsymbol{a}$、绕 z 轴转 α 角、对于原点的反演操作时，式(1.1)可具体表为

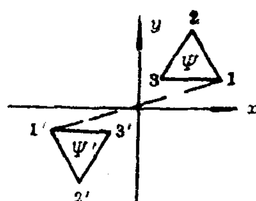
$$\begin{cases} x' = x + a_x \\ y' = y + a_y, \\ z' = z + a_z \end{cases} \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

对于量子体系来说，对它施行空间变换 g 意味着将它的状态 Ψ 在空间中作一次相应的搬动，即将 Ψ 变为新态 Ψ'，而 Ψ' 是 Ψ 在空间中搬动了 g 后得到的。图 1.2 中画出了状态的平移、转动和反演的示意图。暂不考虑自旋，Ψ 是空间坐标的标量函数，按定



(a) 平移 $\boldsymbol{a}$　　　　(b) 绕 z 轴转 α 角



(c) 对原点反演

图 1.2

义，Ψ' 在 $\boldsymbol{r}'=g\boldsymbol{r}$ 处的值即为Ψ在 $\boldsymbol{r}$ 处的值，可写为

$$\Psi'(g\boldsymbol{r})=\Psi(\boldsymbol{r})$$

注意$\boldsymbol{r}$是变数，如将$g\boldsymbol{r}$重新记作$\boldsymbol{r}$,则$\boldsymbol{r}$应记作$g^{-1}\boldsymbol{r}$, g^{-1} 表示 g 的逆操作，因而上式又可写为

$$\Psi'(\boldsymbol{r})=\Psi(g^{-1}\boldsymbol{r}) \qquad (1.2)$$

由状态 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 到状态 $\Psi'(\boldsymbol{r})$ 的变换也可以用对波函数的某种运算来实现，用 $\hat{g}$ 表示这个运算的算子，记作

$$\Psi'(\boldsymbol{r})=\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r}) \qquad (1.3)$$

又可写

$$\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r})=\Psi(g^{-1}\boldsymbol{r}) \tag{1.4}$$

(1.4)式亦可看作算子$\hat{g}$的定义。容易证明，$\hat{g}$是态矢空间（希尔伯特空间）中的线性幺正算子。对于多粒子体系，(1.4)式应改为

$$\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n)=\Psi(g^{-1}\boldsymbol{r}_1,g^{-1}\boldsymbol{r}_2,\cdots,g^{-1}\boldsymbol{r}_n) \tag{1.5}$$

当g为空间反演时，$\hat{g}$便是宇称算子

$$\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r})=\Psi(-\boldsymbol{r}) \tag{1.6}$$

当g为空间平移($\boldsymbol{a}$)时，$\hat{g}$是平移算子。从式(1.4)出发，利用泰勒展开技术不难证明，平移算子的显式为

$$\hat{g}(\boldsymbol{a})=e^{-\boldsymbol{a}\nabla}=e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}} \tag{1.7}$$

其中$\hat{\boldsymbol{P}}$是动量算子，对多粒子体系$\hat{\boldsymbol{P}}$为总动量算子，算子的指数函数定义为

$$e^{\hat{K}}=1+\hat{K}+\frac{\hat{K}^2}{2!}+\cdots+\frac{\hat{K}^n}{n!}+\cdots \tag{1.8}$$

当g为空间转动时，设转动矢量为α，它的方向为转轴方向，大小为转角，$\hat{g}$便是转动算子。同样可证，转动算子的显式为

$$\hat{g}(\alpha)=e^{-\boldsymbol{\alpha}\times\nabla}=e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}} \tag{1.9}$$

其中$\hat{\boldsymbol{L}}$为总轨道角动量算子。

以上考虑了体系的空间变换，它表现为状态的线性幺正变换。当我们对体系施行置换粒子的变换时，情况也是如此。设g为对n个数码（例如粒子的编码）的一个置换

$$g=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n\\ s_1 & s_2 & \cdots & s_n\end{pmatrix} \tag{1.10}$$

对体系的粒子作此置换，也意味着对体系的状态施行一次变

换，用算子 $\hat{g}$ 来表示这个变换，可写

$$\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n)=\Psi(\boldsymbol{r}_{s_1},\boldsymbol{r}_{s_2},\cdots,\boldsymbol{r}_{s_n}) \qquad (1.11)$$

其中$\boldsymbol{r}_i$代表第 i 个粒子的全部变数。易证，由式(1.11)定义的 $\hat{g}$ 也是态矢空间中线性幺正变换。

除了上面两类变换之外，如前所述还有其他类型的变换。由于量子力学中的概念并不都具有经典对应，因而对量子体系施行的变换一般并不能象上面那样由相应的经典概念直观地引出，而是直接由对系统状态的运算给出的。对这一点，不拟作一般的讨论。

对给定的体系，变换 $\hat{g}$ 是否对称变换要由体系的运动方程在 $\hat{g}$ 下是否改变来决定，即要看Ψ与$\hat{g}\Psi$是否满足同一方程。设体系的运动方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat{H}\Psi \qquad (1.12)$$

$\hat{H}$为体系的哈密顿算子。假定 $\hat{g}$ 是一个与 t 无关的变换，将其作用于式(1.12)的两边得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{g}\Psi)=\hat{g}\hat{H}\hat{g}^{-1}(\hat{g}\Psi) \qquad (1.13)$$

Ψ和 $\hat{g}\Psi$ 所满足的方程(1.12)和(1.13)是否为同一个方程，显然取决于是否有

$$\hat{g}\hat{H}\hat{g}^{-1}=\hat{H} \quad 或有 \quad \hat{g}\hat{H}=\hat{H}\hat{g} \qquad (1.14)$$

上式表明：一个变换成为对称变换的充分必要条件是，它的算子与体系的哈密顿算子可易。

全同粒子在物理上是完全平等的，因而当交换体系中的全同粒子的变数时，体系的能量值不会改变。过渡到量子语言，这就是体系的哈密顿算子在全同粒子的置换变换下不变，即有式(1.14)成立。因此，在任何情况下，全同粒子的置换变换是体系的对称变换。

对于空间变换，情况稍复杂些。我们将$\hat{H}$分为动能、内部作用能和在外場中的势能三部分（为简单起见，暂不考虑自旋），即

$$\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}_{内}+\hat{V}_{外}$$

如果将$\hat{H}$形式地写为$\hat{H}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n)$，其中$\boldsymbol{r}_i$标记$\hat{H}$与第$i$个粒子的坐标变数以及对第$i$个粒子的坐标的导数(动量)$\nabla_i$有关，则可写

$$\hat{g}\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\hat{g}^{-1}=\hat{H}(\cdots g^{-1}\boldsymbol{r}_i\cdots) \qquad (1.15)$$

其中 $g^{-1}\boldsymbol{r}_i$ 表明原$\hat{H}$中的$\boldsymbol{r}_i$已用$g^{-1}\boldsymbol{r}_i$取代，∇_i也用相应的由$\boldsymbol{r}_i$导出的变换式所取代。式(1.15)容易由式(1.5)推出

$$\begin{aligned}&\hat{g}\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\hat{g}^{-1}\Psi(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\\&=\hat{g}[\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\Psi(\cdots g\boldsymbol{r}_i\cdots)]\\&=\hat{H}(\cdots g^{-1}\boldsymbol{r}_i\cdots)\Psi(\cdots g^{-1}g\boldsymbol{r}_i\cdots)\\&=\hat{H}(\cdots g^{-1}\boldsymbol{r}_i\cdots)\Psi(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\end{aligned}$$

注意到Ψ是任意态矢，上式与(1.15)式等价。这样，空间操作g成为体系的对称操作的条件可以更直接地表为

$$\hat{H}(\cdots g^{-1}\boldsymbol{r}_i\cdots)=\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)$$

或为

$$\hat{H}(\cdots g\boldsymbol{r}_i\cdots)=\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots) \qquad (1.16)$$

上式是"$\hat{H}$在操作g下不变"的更为直观的表述形式。由式(1.16)容易作出如下判断：因为$\hat{T}$是∇_i^2的函数，而$\nabla^2(=\nabla\cdot\nabla)$象$d\boldsymbol{r}\cdot d\boldsymbol{r}(=dx^2+dy^2+dz^2)$一样变换，故$\hat{T}$在任意空间等距变换下不变；在二体作用下 $\hat{V}_{内}=\sum_{i<j}U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|)$，在空间等距变换下也不变；从而$\hat{H}$的不变性条件归结为$\hat{V}_{外}$的不变性

$$\hat{V}_{外}(\cdots g\boldsymbol{r}_i\cdots)=\hat{V}_{外}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots) \qquad (1.17)$$

所以体系的空间对称操作即是不改变外場的操作。

这里顺便指出，对于孤立系而言，任意空间操作（指空间的等距变换）都是对称操作，这一点可以在更普遍的意义下来

阐明。

物理学发展至今，反复证实了的守恒定律中包含动量和角动量的守恒定律。动量守恒定律的形式为

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{P}}}{dt}=[\hat{\boldsymbol{P}},\ \hat{H}]=0 \qquad 或 \qquad \hat{\boldsymbol{P}}\hat{H}=\hat{H}\hat{\boldsymbol{P}}$$

由式(1.7)知，上式蕴含

$$\hat{g}(\boldsymbol{a})\hat{H}=\hat{H}\hat{g}(\boldsymbol{a})$$

即平移变换是任何孤立系的对称变换。同样，由角动量守恒定律可以推断，转动变换也是任何孤立系的对称变换。既然物理规律在空间的平移和转动下不变，因而就不可能从物理上区分空间的绝对位置和方向，或者说绝对位置和绝对方向是不可观测量。这个事实常常被说成是空间的均匀性和各向同性。但这种说法只能理解成是被物理实践所证实的物理结论（二个守恒定律），而不应看作是空间的某种先验的性质。宇称守恒定律的形式是宇称算子与$\hat{H}$可易，即$\hat{H}$在空间反演操作下的不变性。但在弱相互作用起主要影响的过程中，宇称是不守恒的。这表明弱作用不具有空间反演对称性。当然对于电磁作用和强作用来说，空间反演变换仍然是对称变换。因此，在量子力学应用的通常范围内，可以说对孤立系而言所有的空间操作都是对称操作。注意，“左右同性”不能算是空间的属性，它只反映了电磁作用和强作用的性质。

1.4 对 称 群

前面讲过，一个几何图形或一个物理体系的对称性可以用它的对称变换的集合来描述。这种对称变换的集合显然具有下列运算性质：

1° 任何两个对称变换相乘（结合*）所得的变换仍是一个对称变换；

2° 当几个对称变换相乘时，在不改其次序的条件下，可以将其随意组合（结合律）；

3° 恒等变换是对称变换；

4° 对称变换的逆变换也是对称变换。

其证明留给读者。

具有上面运算性质的集合在数学中叫做群，由图形或物理体系的对称变换构成的群可以称为其对称群。现在可以说，图形或物理体系的对称性由其对称群来刻画。例如，图形1.1(b)的对称群由前面所说的六个操作构成，记作 C_{3v}，则可称此图形具有 C_{3v} 对称。再如，原子中的电子体系，所处的外場是核的中心力場，所以其空间变换的对称群由绕核的所有转动和对于核的反演构成，通常记作 $O(3)$，于是可称此体系具有 $O(3)$ 对称。另外，n 个电子的置换变换也构成它的一个对称群，记作 S_n，所以它同时具有 S_n 对称。$O(3)$ 与 S_n 的总体构成这个体系的完全对称群，可记作 $O(3)\times S_n$。从 $O(3)\times S_n$ 对称性出发，利用群论方法，可以得到关于原子结构和光谱方面的大量知识。因此，对称群概念的引入，其意义决不只是对于物理体系的对称性提供了一种简捷而确切的描述，实际上这一步骤使得群论这一“理论数学”的重要分支能够为物理学所用。

还要说明一点。对前面例举过的空间变换和置换变换的对称群，我们曾用过两套符号：g 的群 $\{g\}$ 和 $\hat{g}$ 的群 $\{\hat{g}\}$。g 和 $\hat{g}$ 的具体含义显然是不同的。例如，当 g 为一空间平移操作时，$\hat{g}$ 为作用于波函数上的一个平移（微分）算子（见(1.7)式）。那么，$\{g\}$ 和 $\{\hat{g}\}$ 中哪一个是体系的对称群呢？显然，按直接

* 我们曾用“结合”一词来表示两个变换接连施行，在数学中通常称为两个变换（算子）相乘。

的意义说，对称群应指 $\{\hat{g}\}$，且前面提过，一般态矢空间中的一个对称变换 $\hat{g}$ 并没有一个对应的 g 存在。但是，在前面讨论过的两类情形中，作为群，$\{g\}$ 和 $\{\hat{g}\}$ 的区别并不重要；因为 g 和 $\hat{g}$ 是一一对应的，且 gg' 在态矢空间中的导出变换为 $\hat{g}\hat{g}'$，所以就群的运算关系来说，在 $\{g\}$ 和 $\{\hat{g}\}$ 中发生的情况是完全平行的，g 和 $\hat{g}$ 好象互为影子。称这样的两个群是同构的。将彼此同构的群中的哪一个作为体系的对称群来研究都可以，当然要取较为方便的。在上面的情形中，取 $\{g\}$ 较为方便，例中写出的群 C_{3v}、$O(3)$、S_n 都是指 $\{g\}$ 而言的，今后仍将如此。

1.5 破缺的对称性

对给定的物理体系，有些对称性可能只是近似成立的。例如，对所有的孤立系，前面举过的空间平移和空间转动对称性，是严格的对称；而空间反演对称性则是近似的，只在弱作用不起作用时才成立。这样，我们所说的孤立系具有三維空间的欧几里德群（等距变换的集合）对称，只能是近似的，或者说这一对称性是破缺的。如果将这个群中的空间反演操作去掉，则得到含于原群中的一个较小的群（称为子群）——刚体的运动群，它就是孤立系的严格对称群。在研究较为复杂的系统时，有时不得不采用模型方法来简化实际问题，模型中将保留体系的哈密顿量的主要部分，去掉其次要部分。这时要考虑模型的对称群，它对眞实的体系来说自然也是近似的，即破缺的。当我们进一步逼近眞实体系时，就要在哈密顿量中加入一些曾被略去的项。这些项的加入将使原模型的部分对称变换可能不再是对称变换了，将这些变换去掉则得到原模型对称群的一个子群，这个子群就是新的对称群。一般地说，模型的对称群对眞实体系来说是破缺的；物理的对称群是模型对称群的子群。在这种場合，群论方法将起重要作用。

我们看到，对称性的破缺，是与存在某些破坏对称变换的哈密顿的修正项相联系的。这对探索相互作用的未知领域有着重要意义。随着认识的深入，原来以为是完整的对称性可能被发现是破缺的，所以这个概念是相对于一定的认识水平而言的。有时它也是相对于一定的应用范围和目的而言的，例如在可以不考虑弱作用的情况下，就不必将空间反演从孤立系的对称群中去掉。

§2 分子的对称性与分子点羣

2.1 空间操作的基本类型

在系统地研究分子对称性之前，先讨论一下空间操作的基本形式，即这些操作的几何分类。这是直观地描述点对称性和空间对称性的常用概念。

空间的等距变换必须将直线变为直线，所以它是线性的。在直角坐标系下，三維空间的线性变换的一般形状为

$$\begin{cases} x' = a_{11}x + a_{12}y + a_{13}z + t_1 \\ y' = a_{21}x + a_{22}y + a_{23}z + t_2 \\ z' = a_{31}x + a_{32}y + a_{33}z + t_3 \end{cases} \tag{2.1}$$

等距条件要求式(2.1)的系数矩阵A是正交的，即有

$$\tilde{A}A = I \tag{2.2}$$

$\tilde{A}$是A的转置，I表示单位矩阵。式(2.2)蕴含

$$\det A = \pm 1 \tag{2.3}$$

事实上，在适当的坐标轴下，实正交矩阵A总可以化为标准形。假定式(2.1)就是在这种坐标轴下写出的，则有

$$A = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix} \tag{2.4}$$

当式(2.3)或(2.4)中的符号取正时，操作(2.1)称为第一类操作；反之，称第二类操作。

对第一类操作，当$\alpha=0$时，式(2.1)为

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\\z'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}t_1\\t_2\\t_3\end{pmatrix} \qquad (2.5)$$

其几何意义是空间的纯平移。当$\alpha\neq0$时，可通过坐标轴的平移将式(2.1)中的t_1和t_2消去*，使式(2.1)化为

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\\z'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\0\\t_3\end{pmatrix} \qquad (2.6)$$

其几何意义是：绕一轴（取为坐标轴z）转动角α并沿轴向平移t_3，这种操作称为螺旋旋转。

对第二类操作，可以通过坐标轴的平移消去式(2.1)中的t_3**，当$\alpha=0$时，式(2.1)化为

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\\z'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}t_1\\t_2\\0\end{pmatrix} \qquad (2.7)$$

其几何意义是：对一平面(取为xy平面)反映并沿此面平移(t_1, t_2)，这种操作称为滑移反映。

当$\alpha\neq0$时，可以进一步通过坐标轴在xy平面内的平移消

---

* 当坐标原点在xy平面内移动(d_1,d_2)时，由式(2.4)和(2.1)知，欲消去式(2.1)中的t_1和t_2，只须令(d_1, d_2)满足方程

$$\begin{cases}(\cos\alpha-1)d_1-\sin\alpha\cdot d_2=-t_1\\ \sin\alpha\cdot d_1+(\cos\alpha-1)d_2=-t_2\end{cases}$$

其系数行列式为$2(1-\cos\alpha)\neq0$，故恒有解。

** 将坐标原点在z轴上移动d，由式(2.1)和(2.4)知，欲消去t_3，只须令$d=t_3/2$。

去式(2.1)中的t_1和t_2，结果式(2.1)化为

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{2.8}$$

其几何意义是：绕一轴（取为坐标轴z）转动α角并对垂直于转轴的平面反映，这种操作称为旋转反映。在式（2.8）中令$\alpha=\beta+\pi$，变换矩阵又可写为

$$\begin{pmatrix} \cos\beta & -\sin\beta & 0 \\ \sin\beta & \cos\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

这表明操作（2.8）也可以看作转动β角并对原点反演的操作，称为旋转反演。

总之，我们看到，任一空间操作必为以下四种形式之一：平移，螺旋旋转，滑移反映和旋转反映（旋转反演）。平移可以算作是螺旋旋转在转角为零时的特例，这样空间操作的形式也可以归结为三种，第一种是第一类操作，后两种是第二类操作。通常又将上述三种形式的操作细分为下列七种形式：

（1）反演

（2）反映

（3）旋转

（4）旋转反映或旋转反演（转角不为零）

（5）平移

（6）滑移反映（移距不为零）

（7）螺旋旋转（转角和移距都不为零）

使空间至少有一个点保持不变的操作称为点操作。显然，在上面的七种操作中，只有前四种为点操作，旋转是第一类点操作，其余三种是第二类点操作。

2.2 分子的点对称性

现在来考虑分子构型的几何对称性及相应的对称群。把分子中的原子看作是固定在平衡位置上的点，同种原子看作是同样的点（等价点），考虑这种点系的几何对称性。

单原子分子，可以作为原子来研究，它具有球对称性，相应的对称群 $O(3)$ 将在后面讨论。

双原子分子或一般的线性分子，其对称类型可分为两类。$A-B$、$A-B-C$ 型分子的对称性显然等同于以分子的轴线为轴的圆锥体的对称性。它的对称操作为｛绕轴转任意角的转动，对于任意含轴的平面的反映｝，对称群的记号是 $C_{\infty v}$。$A-A$、$A-B-A$ 型分子的对称性等同于以分子的轴线为轴的圆柱体（见图1.1(c)）的对称性，其对称群的记号为 $D_{\infty h}$，对称操作已在第一节给出。

多原子的非线型分子，情况要复杂些，先举一个简单的例子。NH_3 分子的结构如同一个正三角锥，三个H原子占据锥底等边三角形的三个顶点，N原子占据锥顶。它的对称性与图1.1(b)中的等边三角形是类似的：将等边三角形看作锥底，三角形的中心看作是锥的轴线，三角形的分角线看作是相应的平面，则由三角形的对称操作便可引出锥体的全部对称操作。因此，NH_3分子的相应对称群是 C_{3v}。

在所举的例子中，有一个共同点：对称群中只含有点操作，而且同一群中所有点操作的点是重合的。这个特点是所有分子共有的。这是由于，分子的构型是一个有限点系，其对称操作中不能含有可导致无限位移者。在七种类型的操作中，后三种都含有移动成份，重复这种操作显然可以产生任意大的位移，所以它们不可能是分子的对称操作。其次可以证明，两个不共点的点操作的乘积必为一个非点操作，它同样导致任意大

的位移。因此，群中的所有点操作必须是共点的。总之，分子对称群中的所有操作必须保持一个共同点不变。这种群统称为点群，它们显然都是 $O(3)$ 的子群。由于分子构型的几何对称群必须是点群，分子的这种对称性也称为点对称性。

从物理学的角度来说，分子点对称性的重要性在于它与分子的物理特性密切相关。在继续讨论分子点群的操作之前，我们先来说明这一点。分子是一种相当复杂的体系，但在一定的近似下，它的运动可以分解为以下三种较单纯的运动：整体（原子固定于平衡位置的刚体）的平动和转动；原子的微振动；电子体系在固定（平衡位置）核場中的运动。这三种运动都与分子的点对称性——点群相关。

关于转动，分子的惯量椭球的对称性显然取决于分子的点对称性。

关于电子的运动，如上节中指出的，其运动方程的空间对称性归结为所处外場的对称性，而这个外場正是原子核的电場，它有与場源相同的几何对称性。因此，分子点群也是分子中电子体系的对称群。以后将会看到，借助于这一对称性，可以将分子中的电子态进行分类，并导致相应的物理结果。

关于原子的微振动，我们要指出，分子点群也是原子微振动方程的对称群。因而由分子点群出发，用群论方法同样可将原子的振动模式分类。

设有N个原子组成的体系，令 $x_i^0(i=1,2,\cdots,3N)$ 为平衡位置坐标，$q_i=\sqrt{m_i}(x_i-x_i^0)$ 是原子相对于平衡位置的位移坐标（其中 $m_1=m_2=m_3$是第一个原子的质量，等等）。精确到微位移的二次幂，原子的相互作用能的表达式为

$$
\begin{aligned}
&V(\cdots x_i^0\cdots;\ \cdots q_i\cdots)\\
&=V_0(\cdots x_i^0\cdots)+1/2\sum_{i,j}f_{ij}(\cdots x_i^0\cdots)q_iq_j
\end{aligned}
$$

其中 f_{ij} 是原子间的相互作用能对原子位移坐标的二次导数在

位移等于零处的值，是原子平衡位置的函数。因而，该体系的经典微振动方程为

$$\ddot{q}_i + \sum_{j=1}^{3N} f_{ij} q_j = 0 \qquad i = 1, 2, \cdots, 3N$$

写成矩阵形式

$$\frac{d^2}{dt^2} Q + FQ = 0 \tag{2.9}$$

其中 Q 和 F 分别为

$$Q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_{3N} \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} \cdots\cdots f_{13N} \\ f_{21} & f_{22} \cdots\cdots f_{23N} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ f_{3N1} & f_{3N2} \cdots\cdots f_{3N3N} \end{pmatrix} \tag{2.10}$$

为了说明分子的点群也是方程 (2.9) 的对称群，考察在任意空间操作 g 下，(2.9)式的变换。令

$$q_i \to q_i' = g q_i, \quad x_i^0 \to x_i^{0\prime} = g x_i^0 \tag{2.11}$$

代入式(2.9)得

$$\frac{d^2}{dt^2} Q' + F(\cdots x_i^{0\prime} \cdots) Q' = 0 \tag{2.12}$$

对比式(2.12)和式 (2.9) 可看出，振动方程的不变性，只要求

$$F(\cdots g x_i^0 \cdots) = F(\cdots x_i^0 \cdots) \tag{2.13}$$

与原子间的相互作用能不同，函数 f_{ij} 不是在任意空间操作下不变的。但对分子的点对称操作来说，只相当于置换了相同原子的(平衡)位置，这不会引起任何作为原子位置的函数的物理量的改变。即当 g 为分子的点对称操作时，不变性条件(2.13)成立。可见，分子的点群也是其原子微振动方程的对称群。我们看到，空间任意操作 g 按式(2.11)导致 $3N$ 维 Q 空间中的一个变换：$Q \to Q'$。在 g 下，原子的坐标 x_i 和 x_i^0 均按式(2.1)变换，因而坐标差 $x_i - x_i^0$ 和 q_i 都按式(2.1)的齐次部分变换。从

而变换$Q\to Q'$是齐次线性变换，设其矩阵为$S(g)$，可写

$$Q'=S(g)Q \tag{2.14}$$

这就是操作g在N个原子的$3N$维位移空间中的表现。振动方程的对称性也可以用Q空间中的变换形式来表述。注意矩阵$S(g)$显然有下列性质：

$$\tilde{S}S=1 \tag{2.15}$$

$$S(g)S(h)=S(gh) \tag{2.16}$$

考虑用矩阵$S(g)$表示在空间操作g下F的变换法则，为此可将前面的原子相互作用能的表达式改写为

$$\begin{aligned}&V(\cdots x_i^0\cdots;\ \cdots q_i\cdots)\\&=V_0(\cdots x_i^0\cdots)+\frac{1}{2}\sum_{i,j}f_{ij}(\cdots x_i^0\cdots)q_iq_j\\&=V_0(\cdots x_i^0\cdots)+\frac{1}{2}\tilde{Q}F(\cdots x_i^0\cdots)Q\end{aligned}$$

此能量是原子间距的函数，因而在任意空间等距变换g下是不变的。即用变换(2.11)代入上式时，V和V_0都不变，因而式中的二次项也不变

$$\tilde{Q}'F(\cdots gx_i^0\cdots)Q'=\tilde{Q}F(\cdots x_i^0\cdots)Q$$

由式(2.14)知

$$\tilde{S}(g)F(\cdots gx_i^0\cdots)S(g)=F(\cdots x_i^0\cdots)$$

或

$$F(\cdots gx_i^0\cdots)=S(g)F(\cdots x_i^0\cdots)S^{-1}(g) \tag{2.17}$$

对比(2.13)式，振动方程在g下不变的条件现在又可用g在Q空间中的导出变换表为

$$S(g)F=FS(g) \tag{2.18}$$

即变换$S(g)$与矩阵F可易。由前面的结果知，当g为分子的点对称操作时，式(2.18)成立。由式(2.15)和式(2.16)可见，当$\{g\}$为分子点群时，$\{S(g)\}$为$3N\times 3N$的正交矩阵群，后

者是前者在 $3N$ 維 Q 空间中的表現。

以上的讨论表明，分子的点群既是电子体系（量子）的对称群又是原子微振动（经典）的对称群：前者表现为作用于电子体系的态矢（Ψ）空间上的幺正线性算子群 $\{\hat{g}\}$，它与电子系的哈密顿算子可易；后者表现为作用于原子体系的位移空间 $\{Q\}$ 中的幺正矩阵群 $\{S(g)\}$，它与原子系的 F 矩阵可易。这样，我们就能够由分子点群出发，在同样的数学形式（群表示理论）下，对分子中的电子态和原子的振动模式进行对称分析。

2.3　点操作的运算性质　点群的乘法表

点群中的所有点操作是共点的，即这些操作的转轴、映面、反演中心等等（统称为对称元素）都相交于空间的一点。所以，对点群中的转动，只需指明转轴的方向和转角或统一为转动矢量；对反映，只需指明反映面的方位，如法线的方向，等等。于是，对点操作的四种基本形式，可用下列符号标记：

反演——i

反映——$\sigma(\boldsymbol{m})$

旋转——$C(\boldsymbol{n},\alpha)$

旋转反演——$iC(\boldsymbol{n},\alpha)$

旋转反映——$S(\boldsymbol{n},\alpha)=\sigma(\boldsymbol{n})C(\boldsymbol{n},\alpha)$

$$=iC(\boldsymbol{n},\alpha+\pi)$$

这些共点的点操作具有以下运算性质：

$$i^2=I \tag{2.19}$$

$$\sigma(\boldsymbol{m})^2=I \tag{2.20}$$

$$\sigma(\boldsymbol{m}_2)\sigma(\boldsymbol{m}_1)=C(\boldsymbol{m}_1\times\boldsymbol{m}_2,2\phi(\boldsymbol{m}_1,\boldsymbol{m}_2)) \tag{2.21}$$

$$i\sigma(\boldsymbol{m})=C(\boldsymbol{m},\pi) \tag{2.22}$$

$$C(\boldsymbol{n},\beta)C(\boldsymbol{n},\alpha)=C(\boldsymbol{n},\alpha+\beta) \tag{2.23}$$

$$C(\boldsymbol{n}_2,\beta)C(\boldsymbol{n}_1,\alpha)=C(\boldsymbol{n}_3,\gamma) \tag{2.24}$$

$$ig = gi \tag{2.25}$$

$$g\sigma(\boldsymbol{m})g^{-1} = \sigma(g\boldsymbol{m}) \tag{2.26}$$

$$gC(\boldsymbol{n}, \alpha)g^{-1} = C(\pm g\boldsymbol{n}, \alpha) \tag{2.27}$$

其中 I 表示恒等操作；$\phi(\boldsymbol{m}_1, \boldsymbol{m}_2)$ 表 $\boldsymbol{m}_1$ 与 $\boldsymbol{m}_2$ 的夹角；g 表示任意点操作；式(2.27)中的正负号取决于 g 是第一类还是第二类操作；(2.24)式中的$\boldsymbol{n}_3$和 γ 按下列关系由$(\boldsymbol{n}_1, \alpha)$和$(\boldsymbol{n}_2, \beta)$来决定：以 $\boldsymbol{n}_1$、$\boldsymbol{n}_2$和 $-\boldsymbol{n}_3$ 的端点在单位球面上的位置为顶点的球面三角形的三个内角分别为$\alpha/2$、$\beta/2$和$\gamma/2$。上述运算法则都不难用初等的几何作图加以证明，可供读者当作练习[26]，[2]。熟习了这些运算法则，就可以完成点群内的任何运算，例如由式(2.24)可以用简单的作图来合成任意两个共点转动，用式(2.26)、(2.27)容易将点群的元素分为共轭类等等。特别是，只要知道了点群的全部操作，由这些法则便可立即得到点群操作间的乘法规则——乘法表。下面仅举二例。

例 1 C_{3v} 的乘法表。

我们已知 C_{3v} 的六个元素（操作）是：I，

$$C_3 = C\left(\boldsymbol{n}, \frac{2\pi}{3}\right),\ C_3^2 = C\left(\boldsymbol{n}, 2\frac{2\pi}{3}\right),$$

$\sigma_v^{(1)} = \sigma(\boldsymbol{m}_1)$，$\sigma_v^{(2)} = \sigma(\boldsymbol{m}_2)$，$\sigma_v^{(3)} = \sigma(\boldsymbol{m}_3)$，其中$\boldsymbol{n}$是 3 次轴，$\boldsymbol{m}_1$、$\boldsymbol{m}_2$、$\boldsymbol{m}_3$ 在垂直于 $\boldsymbol{n}$ 的平面上均匀分布。容易作出其中任二操作的乘积，如：

$$\sigma_v^{(2)}\sigma_v^{(1)} = \sigma(\boldsymbol{m}_2)\sigma(\boldsymbol{m}_1) = C\left(\boldsymbol{n}, 2\frac{2\pi}{3}\right) = C_3^2 \text{（见图 2.1）},$$

$\sigma_v^{(1)}C_3 = \sigma_v^{(1)}C_3^2C_3^{-1} = \sigma_v^{(1)}(\sigma_v^{(1)}C_3\sigma_v^{(1)})C_3^{-1} = C_3\sigma_v^{(1)}C_3^{-1} = \sigma_v^{(1)}(C_3\boldsymbol{m}_1) = \sigma_v^{(2)}$，等等。将这些乘法规则列成如下醒目的表格，便是 C_{3v} 的乘法表，即左侧的列中元左乘上面的行中元。由乘法表可以看出含有第二类操作的点群的某些普遍性质，例如：其中的所有第一类操作形成点群的一个子群，其中

的所有第二类操作可由点群中的任意一个第二类操作遍乘这个子群的操作来生成。

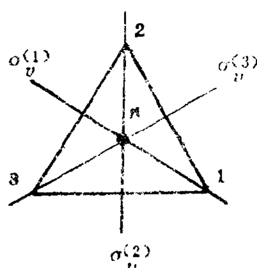


图 2.1 C_{3v} 的对称元素

C_{3v}	I	C_3	C_3^2	$\sigma_v^{(1)}$	$\sigma_v^{(2)}$	$\sigma_v^{(3)}$
I	I	C_3	C_3^2	$\sigma_v^{(1)}$	$\sigma_v^{(2)}$	$\sigma_v^{(3)}$
C_3	C_3	C_3^2	I	$\sigma_v^{(1)}$	$\sigma_v^{(2)}$	$\sigma_v^{(3)}$
C_3^2	C_3^2	I	C_3	$\sigma_v^{(1)}$	$\sigma_v^{(1)}$	$\sigma_v^{(3)}$
$\sigma_v^{(1)}$	$\sigma_v^{(1)}$	$\sigma_v^{(2)}$	$\sigma_v^{(3)}$	I	C_3	C_3^2
$\sigma_v^{(2)}$	$\sigma_v^{(2)}$	$\sigma_v^{(3)}$	$\sigma_v^{(1)}$	C_3^2	I	C_3
$\sigma_v^{(3)}$	$\sigma_v^{(3)}$	$\sigma_v^{(1)}$	$\sigma_v^{(2)}$	C_3	C_3^2	I

例 2 $D_{\infty h}$ 的“乘法表”

$D_{\infty h}$ 是无限群，其操作依赖连续变化的参数，可引入如下的符号：$C(\alpha)=C(\boldsymbol{n},\alpha)$，$C_\varphi=C(\boldsymbol{n}_2,\pi)$，$\sigma_\psi=\sigma(\boldsymbol{m})$，$S(\beta)=S(\boldsymbol{n},\beta)=\sigma(\boldsymbol{n})C(\beta)$，其中$\boldsymbol{n}$是固定的主轴，$\boldsymbol{n}_2$是在垂直于$\boldsymbol{n}$的平面上变化的二次轴，$\boldsymbol{m}$是在垂直于$\boldsymbol{n}$的平面上变化的映面法线，$\varphi$和$\psi$分表二次轴和映面在平面上的方位角。这时群内的乘法规则也可写成如下的表，但連续参数依赖的部分用函

数形式表示。

$D_{\infty h}$	$C(\alpha)$	C_φ	σ_ψ	$S(\beta)$
$C(\alpha')$	$C(\alpha+\alpha')$	$C_{\varphi+\frac{\alpha'}{2}}$	$\sigma_{\psi+\frac{\alpha'}{2}}$	$S(\beta+\alpha')$
$C_{\varphi'}$	$C_{\varphi'-\frac{\alpha}{2}}$	$C(2\varphi'-2\varphi)$	$S(2\varphi'-2\psi)$	$\sigma_{\psi'-\frac{\beta}{2}}$
$\sigma_{\psi'}$	$C_{\varphi'-\frac{\alpha}{2}}$	$S(2\psi'-2\varphi)$	$C(2\psi'-2\psi)$	$C_{\psi'-\frac{\beta}{2}}$
$S(\beta')$	$S(\alpha+\beta')$	$\sigma_{\psi+\frac{\beta'}{2}}$	$C_{\varphi+\frac{\beta'}{2}}$	$C(\beta+\beta')$

2.4 非线型分子与有限点群

线型分子只有两种对称类型，即 $C_{\infty v}$ 和 $D_{\infty h}$。这两个点群都是无限的，即含无限个操作。因为，线型分子的原子是共线的，绕此线的任何转角的转动都是对称操作。非线型分子不存在这样的转轴，它的任何一个转轴都有轴外原子。每个轴外原子只能有有限个等价原子，因而绕这种轴的旋转只能有有限个不同的转动。设其中最小的转角为 α_0，则 α_0，$2\alpha_0\cdots$，$n\alpha_0$，$\cdots$都是其中的转角。有限性要求后面的转角必将重复前面的转动，当 n 充分大后，假如 $n_2\alpha_0$ 和 $n_1\alpha_0$ 是给出同一个转动的相邻的转角，则有 $n_2\alpha_0=n_1\alpha_0+2\pi$，或（令 $n=n_2-n_1$）

$$\alpha_0=\frac{2\pi}{n}$$

所以绕此轴只有 n 个不同的旋转，记作

$$C_n=C\left(\boldsymbol{n},\frac{2\pi}{n}\right),\ C_n^2=C\left(\boldsymbol{n},2\frac{2\pi}{n}\right),\ \cdots\cdots,$$

$$C_n^n=C(\boldsymbol{n},2\pi)=I$$

这种转轴称为 n 次轴。可见，非线型分子的点群中只能含有有限次的转轴。同样的道理，它也只能含有限次的映轴（或反轴）。n 次映轴的最小转角也是 $2\pi/n$。当 n 为偶数时，n 次映轴包含 n 个操作：

$$S_n=\sigma(\boldsymbol{n})C_n,\ S_n^2=C_n^2,\ S_n^3=\sigma(\boldsymbol{n})C_n^3,\ \cdots\cdots,$$
$$S_n^n=C_n^n=I$$

当 n 为奇数时，n 次映轴含有 $2n$ 个操作：

$$S_n=\sigma(\boldsymbol{n})C_n,\ S_n^2=C_n^2,\ \cdots,\ S_n^n=\sigma(\boldsymbol{n})C_n^n=\sigma(\boldsymbol{n}),$$
$$S_n^{n+1}=C_n,\ S_n^{n+2}=\sigma(\boldsymbol{n})C_n^2,\ \cdots,$$
$$S_n^{2n}=C_n^n=I$$

注意 $\sigma(\boldsymbol{n})$ 与 $C(\boldsymbol{n},\alpha)$ 是可对易的，这含于式(2.26)中，也易直接证明。只含有有限次转轴和映轴的点群只能是有限的，这一点在后面推导所有点群时，可以具体看到。总之，非线性分子的点群都是有限点群。我们将导出有限点群的所有可能的形式。

由点操作的运算性质，已经具体看到，乘法运算在第一类操作中是封闭的，在第二类操作中则不封闭。所以单是第一类操作可以成群，单是第二类操作则不能成群。因而，点群可以分为两大类：只含第一类操作的称为第一类点群；同时含有两类操作的称为第二类点群。在系统地讨论有限点群时，作出这种划分是必要的。

2.5 第一类（有限）点群

我们利用群的一般性质和点操作的运算法则，来构成有限点群。

第一类点群只含有旋转操作，所以它完全由所含转轴的轴次和分布决定，可分为三种情形：只有一个转轴；有一个以上转轴，但高于二次的轴至多只有一个；有一个以上的高于二次

的转轴。

在第一种情形下，设唯一的转轴轴次为 n，所得的点群记作 C_n，则有

$$C_n=\{I, C_n, C_n^2, \cdots, C_n^{n-1}\}.$$

其中 n 可取任何正整数。

在第二种情形下，设唯一可能的高次轴轴次为 n（也不排除$n=2$），则其他的轴都是二次的。需要确定的是这些二次轴的个数和分布。首先，这些二次轴必须与 n 次轴垂直。因为，按式(2.24)，$C\left(\boldsymbol{n}_n, \frac{2\pi}{n}\right)C(\boldsymbol{n}_2, \pi)=C(\boldsymbol{n}, \gamma)$也是群中的转动，由简单的球面作图易证，当二次轴$\boldsymbol{n}_2$与 n 次轴 $\boldsymbol{n}_n$ 不垂直时，将有$\gamma<\pi$，这表明沿$\boldsymbol{n}$方向存在一个高次轴，这与 $\boldsymbol{n}_n$ 是唯一可能的高次轴相矛盾。其次，由式(2.24)和球面作图同样可以证明，与已知二次轴夹角（都在垂直于 n 次轴的平面上）为$\frac{1}{2}\ \frac{2\pi}{n}$的方向上也存在一个二次轴，所以至少存在相邻夹角为$\frac{1}{2}\ \frac{2\pi}{n}$的 n 个二次轴。最后，同法可证，两个二次轴的夹角不能小于$(1/2)\cdot(2\pi/n)$；因为绕这两个轴转 π 角的转动合成一个转动，它以垂直于此二轴的方向为轴以此二轴夹角之二倍为转角，但由于不存在高于 n 次的轴，这合成转角不得不小于 $2\pi/n$。因此，在上述 n 个二次轴外，不再存在其他二次轴。总之，这种点群的轴系是一个 n 次轴及 n 个与之垂直的、相邻夹角为$(1/2)\cdot(2\pi/n)$的二次轴，点群的记号是D_n。这个群有$2n$个操作，当 n 为奇数时可写为

$$D_n=\{I, C_n, C_n^2, \cdots, C_n^{n-1}, C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, \cdots, C_2^{(n)}\}$$

$$=\{I, 2C_n, 2C_n^2, \cdots, 2C_n^{\frac{n-1}{2}}, nC_2\}$$

n为偶数时写为

$$D_n=\{I,C_n,\cdots,C_n^{n-1},C_2^{(1)},\cdots,C_2^{(\frac{n}{2})},$$
$$C_{2d}^{(1)},\cdots,C_{2d}^{(\frac{n}{2})}\}$$
$$=\left\{I,2C_n,2C_n^2,\cdots,2C_n^{\frac{n}{2}-1},C_n^{\frac{n}{2}},\frac{n}{2}C_2,\frac{n}{2}C_{2d}\right\}$$

其中 $C_2^{(i)}$ 表示绕第 i 个二次轴转 π 的操作$C(n_2^i,\pi)$，nC_2 是 n 个这种操作的简写；对 $n=$偶数的情况 C_2 被分为两类 C_2 和 C_{2d}，其轴互为角分线。在罗列群的元素时，习惯的简单记法是，同一共轭元素类中的元素用一个符号表示并在前面冠以这类元素的个数。这种记法中，同时指明了群元的类。D_n 在 n 为奇、偶数时的记法之所以不同，就是因为类的划分不同：前一情况下所有的 C_2 属于一类；后一情况下，C_2 属于两个不同的类。两种情况下，绕 n 次轴的每两个互逆的旋转都各成一类。共轭元素类的概念将在后面讨论，那时容易明白，D_n 的类为什么是如此划分的。D_n 的指标 n（主轴的轴次）可取大于1的任何整数。

在第三种情形下，群中有两个或多个高次轴以及若干个二次轴，怎样确定这些轴的轴次和分布，从而确定点群？由于对称群的一般性质和共点旋转操作的具体运算性质的限制，这些轴的轴次和分布显然不可能是随意的，只有有限个确定的解。现在来导出这些解。首先考虑高次轴的分布问题。在高次轴中任取两个"相邻"的，设其轴次分别为 n 和 m。以 m 表所取 m 次轴的方向，则由式(2.27)可写

$$C_nC\left(m,\frac{2\pi}{m}\right)C_n^{-1}=C\left(C_nm,\frac{2\pi}{m}\right)$$

群的性质保证上式右边的操作——绕轴 C_nm 转 $2\pi/m$ 角的旋转也是该点群中的操作，进而推知 C_nm 方向也存在一个 m 次轴。同理，$C_n^2m,\cdots\cdots,C_n^{n-1}m$ 也都是 m 次轴。这样，在一个

n 次轴的周围均匀分布着 n 个 m 次轴：$m, C_n m, \cdots\cdots, C_n^{n-1}m$，这 n 个单位矢量的末端成为一个正 n 边形的顶点，n 次轴垂直穿过正 n 边形的中心。同理，在这 n 个 m 次轴的每一个轴的周围又衍生出 $(m-1)$ 个 n 次轴来。这样，每个 m 次轴方向矢量的末端将是 m 个正 n 边形的公共顶点，而每个正 n 边形的中心被一个 n 次轴垂直穿过。如此继续下去，点群的中心点将被正 n 边形所包围，形成一个正多面体：n 次轴通过其面心，m 次轴通过其顶点。由于所取的两个初始轴是相邻的高次轴，因此在上面所得的（衍生）轴系中不可能再插入新的高次轴了。这就解决了高次轴可能的轴次和分布问题。关于群中的二次轴，其存在条件是，它的操作必须将每个高次轴变为同次的高次轴；否则是不允许的。例如按

$$C_2 C(m, 2\pi/m) C_2^{-1} = C(C_2 m, 2\pi/m)$$

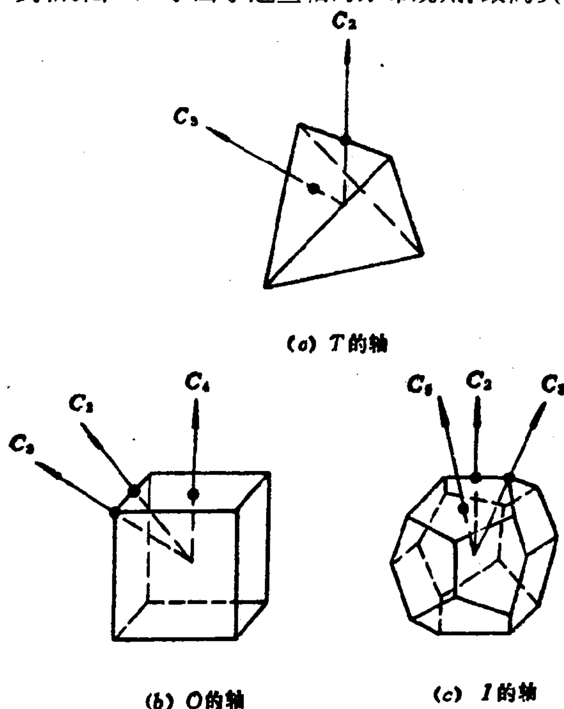
将在 $C_2 m$ 方向引出一个新的 m 次轴。这个条件也可表述为，二次轴的操作必须使上述正多面体复原。综上所述，第三种情形下的点群必须是某个正多面体的对称群，它最多只能有两种轴次的高次轴，一种轴通过多面体的面心，一种通过顶点。大家知道，正多面体只有 5 种。简单证明如下：设其面为正 n 边形，顶角为 m 面角，则有以下限制：$n, m \geqslant 3$；$m\theta < 2\pi$，θ 为正 n 边形的内角；$n\theta = (n-2)\pi$。即有方程组（消去 θ）

$$\begin{cases} n \geqslant 3 \\ m \geqslant 3 \\ \left(1 - \dfrac{2}{n}\right) m < 2 \end{cases}$$

其解为

$$\binom{n}{m} = \binom{3}{3}, \binom{3}{4}, \binom{3}{5}, \binom{4}{3}, \binom{5}{3}$$

这就是：正四面体，正八面体，正二十面体，正六面（立方）体，正十二面体。细心的读者会注意到，前面的推演中所取的两个初始高次轴是彼此平等的，因而与同一点群轴系相联系的还有另一个正多面体：n次轴通过其顶点，m次轴通过其面心。所以，n（面的边数）、m（顶角的面数）值互换的两个正多面体的对称群相同。于是，五种正多面体的对称群只有三种：正四面体群T，正六（八）面体群O，正十二（二十）面体群I。T有四个三次轴，三个二次轴；O有三个四次轴，四个三次轴，六个二次轴；I有六个五次轴，十个三次轴，十五个二次轴。图 2.2 示出了这些轴的分布规则：最高次轴通过所取



(a) T的轴

(b) O的轴

(c) I的轴

图 2.2

正多面体的面心，次高次轴通过顶角，二次轴通过棱的中点。不难写出群中的操作：

$$T=\{I, 3C_2, 4C_3, 4C_3^2\}$$

$$O=\{I, 6C_2, 8C_3, 6C_4, 3C_4^2\}$$

$$I=\{I, 15C_2, 20C_3, 12C_5, 12C_5^2\}$$

至此，已经穷尽了第一类有限点群，共有C_n, D_n, T, O, I五个类型。

2.6 第二类（有限）点群

为了具体构造第二类点群，需对其一般结构作一分析。由于第二类操作的两次乘积（和乘幂）是第一类操作，故第二类点群中必含有第一类操作；又，点群中的所有第一类操作在点群的乘法下是封闭的，它们必形成点群的一个子群。如用点群中任一个第二类操作遍乘群中所有操作，必将群中全体第一类操作变为第二类操作，将全体第二类操作变为第一类操作，但整个点群不变。所以这必须恰是群中的一、二类操作互换。从而点群的所有第二类操作可由其中任一第二类操作遍乘群中第一类操作来生成，因此第二类点群中两类操作的数目总是各占一半。第二类点群C_{3v}的构成及乘法表即为上述事实的一个具体例证。以上的分析表明，第二类点群$G=\{g\}$有如下的结构：其中第一类操作的全体$G_1=\{g_1\}$是它的一个子群，而第二类操作的全体可写为$\{g_2g_1', g_2g_1'', \cdots\cdots\}=g_2\{g_1\}=g_2G_1$，$g_2$是$G$的任一第二类操作。用符号表示，就是

$$G=G_1\cup g_2G_1 \tag{2.28}$$

出现在G中的第二类操作g_2，显然不能是随意的，它必须与G_1相协调或被G_1所允许。这个协调条件是由群的性质和点操作的运算规则决定的

$$g_2^2\in G_1 \tag{2.29}$$

$$g_2C(\boldsymbol{n},a)g_2^{-1}=C(-g_2\boldsymbol{n},a)\in G_1 \tag{2.30}$$

式(2.30)表示，g_2 将 G_1 的每个转轴变为 G_1 的一个同次轴，即 g_2 不改变G_1 的轴系。

由上面的分析，我们找到一种由已知的第一类点群，通过加进一个允许的第二类操作，扩充成第二类点群的方案(2.28)。让G_1 取遍所有的第一类点群，对每个 G_1 让 g_2 取遍所有允许的第二类操作，式(2.28)便给出所有第二类点群。需注意，对同一个G_1，由两个不同的 g_2 所生成的G可能是相同的。为避免重复，应在每组具有相同扩充效果的第二类操作中只取一个。具有相同扩充效果的第二类操作可以如下识别：

$$g_2'G_1=g_2G_1 \Longleftrightarrow g_2'g_1'=g_2g_1 \Longleftrightarrow g_2^{-1}g_2'=g_1g_1'^{-1}=g_1''$$

再注意到(2.29)式，这个条件可明确写为

$$g_2^{-1}g_2'\in G_1 \text{ 或 } g_2g_2'\in G_1 \tag{2.31}$$

利用式(2.31)立刻可以看出，进行扩充时，在三种第二类操作 i、σ、S_n中，我们只需考虑 i、σ 和S_{4m}（m为自然数)型的操作。这是因为：$\sigma S_{4m+1}=S_{4m+1}^{4m+1}S_{4m+1}=S_{4m+1}^{4m+2}=(S_{4m+1}^2)^{2m+1}\in G_1$（注意，由于式(2.29)，$S_{4m+1}^2\in G_1$)，故可用$\sigma$ 取代S_{4m+1}；同理可用σ 取代S_{4m+3}；$i=\sigma C_{4m+2}^{2m+1}=S_{4m+2}^{2m+1}$，$iS_{4m+2}=S_{4m+2}^{2m+2}=(S_{4m+2}^2)^{m+1}\in G_1$，故可用 i 取代 S_{4m+2}。

对第一类点群C_n，允许的第二类操作，即其平方是C_n中的一个操作，且它不改变 C_n 的轴的有：i，σ_h(映面垂直n次轴)，σ_v（映面通过 n 次轴），n 为偶数时的 S_{2n}。但当 $n=2m$ 时，有 $\sigma_h i=C_2=C_n^m\in$ 群 C_n，故可用 σ_h 取代 i，因而可只在 n 为奇数时引入 i。这样，由 C_n 便可得到如下的扩充结果：

$$C_n\begin{cases}\xrightarrow{\sigma_h} & C_{nh}=C_n\cup\sigma_h C_n\\ \xrightarrow{\sigma_v} & C_{nv}=C_n\cup\sigma_v C_n\\ \xrightarrow{i} & C_{ni}=C_n\cup iC_n\ (n\text{为奇数})\\ \xrightarrow{S_{2n}} & S_{2n}=C_n\cup S_{2n}C_n(n\text{为偶数})\end{cases}$$

对第一类点群 D_n，允许的第二类操作有：i，σ_h（映面垂直于 n 次轴），σ_v(映面通过 n 次轴和一个二次轴)，σ_d（映面通过 n 次轴和相邻二次轴的分角线)，当 n 为偶数时的 S_{2n}。但 $\sigma_h\sigma_v=C_2\in D_n$、故 σ_v 可用σ_h取代；又当$n=2m$时，$\sigma_h i=C_n^m\in D_n$，$\sigma_d S_{2n}=\sigma_d\sigma_h C_{2n}=C_{2d}C_{2n}=C_2\in D_n$，故 i 和 S_{2n} 可分别由 σ_h 和 σ_d 取代；当 $n=2m+1$ 时，$\sigma_d i=C_2\in D_n$，i 可由 σ_d 取代。总之，只需用σ_h和 σ_d 进行扩充。结果为

$$D_n\begin{cases}\xrightarrow{\sigma_h}D_{nh}=D_n\cup\sigma_h D_n\\ \xrightarrow{\sigma_d}D_{nd}=D_n\cup\sigma_d D_n\end{cases}$$

对第一类点群 T，允许的第二类操作有：i，σ_h或σ_v（通过两个二次轴，垂直于一个二次轴），σ_d（通过一个二次轴和另两个二次轴的分角线），S_4（重合于一个二次轴）。但有 $\sigma_h i=C_2\in T$，$\sigma_d S_4=C_2\in T$，故可只用σ_h和 σ_d进行扩充。结果为

$$T\begin{cases}\xrightarrow{\sigma_h}T_h=T\cup\sigma_h T\\ \xrightarrow{\sigma_d}T_d=T\cup\sigma_d T\end{cases}$$

对第一类点群 O，允许的第二类操作有：i，σ_h 或 σ_v(垂直于一个四次轴，通过两个四次轴），σ_d（通过一个四次轴和另两个四次轴的分角线），S_4（重合于四次轴）。但：$\sigma_h i=C_4^2\in O$，$\sigma_h\sigma_d=C_2\in O$　$\sigma_h S_4=C_4\in O$，故只需用 σ_h 扩充。

结果是

$$O \xrightarrow{\sigma_h} O_h = O \cup \sigma_h O$$

对第一类点群 I，允许的第二类操作有：i，σ_d（通过一个二次轴和两个相邻三次轴的分角线）。但 $\sigma_d i = C_2 \in I$，故只需用 σ_d 扩充。结果是

$$I \xrightarrow{\sigma_d} I_d = I \cup \sigma_d I$$

至此，我们已经完成了第一类有限点群一切可能的扩充，从而得到了全部第二类有限点群。

全部点群又可按高次(大于二次的)轴的数目分成三大类：含有一个以上高次轴的点群称为高级点群；只含有一个高次轴的点群称为中级点群；沒有高次轴的点群称为低级点群。将所得有限点群按级别来分类，便是：

高级点群　T, O, I, T_h, T_d, O_h 和 I_d

中级点群　$n>2$的 C_n，C_{nh}，C_{ni}，C_{nv}，D_n，D_{nh} 和 $n\geqslant 2$ 的 D_{nd} 及 $n=4m$ 的 S_n

低级点群　$C_1, C_i, C_s, C_2, C_{2h}, C_{2v}, D_2$ 和 D_{2h}

其中$C_i = C_{1i} = \{I, i\}$，$C_s = C_{1h} = C_{1v} = \{I, \sigma\}$。$D_{2d}$ 属于中级点群的原因是它含有一个四次映轴：按定义 $D_{2d} = D_2 \cup \sigma_d D_2 = \{I, C_2, C_2^{(1)}, C_{2d}^{(1)}\} \cup \{\sigma_d^{(1)}, \sigma_d^{(1)} C_2, \sigma_d^{(1)} C_2^{(1)}, \sigma_d^{(1)} C_{2d}^{(1)}\} = \{I, C_2, C_2^{(1)}, C_{2d}^{(1)}, \sigma_d^{(1)}, \sigma_d^{(2)}, S_4, S_4^3\}$，四次映轴沿$D_2$ 的二次主轴的方向。点群的级别也就是它所刻划的对称性的级别，它反映了对称性的高低。例如，不难看出，分子的惯量椭球对于具有高级、中级和低级点对称的分子将分别为球、回转椭球和非回转椭球。

§3 晶体的对称性与晶体点羣、空间羣

3.1 晶格的对称操作

理想晶体的晶格点群形成一组离散的三維点列，与分子的情况不同，这个点列是无限的。通常说的晶体对称性就是指晶格点阵的几何对称性，它决定着晶体的许多宏观性质。对晶体中的电子体系来说，它所处的外場就是晶格点阵(場源)的場，因而具有与点阵相同的对称性。所以，晶格的对称群同时也是晶体内电子体系的对称群，即电子体系哈密顿算子的对称群，它决定着电子能级结构和状态的分类。

点阵是无限的，因而其对称操作不限于点操作，事实上空间操作的七种形式都可以在点阵的对称群中出现。在每种形式的操作中，究竟哪些才能充当点阵的对称操作？

首先考虑纯平移操作。点阵是离散的，因而其对称操作也必须是离散的。即不存在无穷小操作。平移操作可以用位移矢量来描写，离散性条件要求这些位移矢量可以写为

$$\boldsymbol{n}=n_1\boldsymbol{e}_1+n_2\boldsymbol{e}_2+n_3\boldsymbol{e}_3 \qquad (3.1)$$

其中 n_i 为整数，$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_3$是三个线性无关的矢量。为了使问题的实质更加突出，以下只针对一維点阵给出这个结论的证明(图1.1(a)便是一个一維点阵)。

由于不存在无穷小对称平移，对称平移的值必有下限。设e为最小对称平移，则任一对称平移总可写为Ce，C为实数。又设n为不超过C的最大整数，按对称操作的群性质，ne也是对称位移，从而$(C-n)e$也是一个对称位移。但$|C-n|<1$，若$(C-n)e$不为零，则是一个比e更小的位移，这与e是最小位移的假设相抵触，故必有$C=n$。所以，这个一維点阵的任意

对称位移都可写为最小位移的整数倍ne。

在三维点阵的情形，与e有最小长度相对应的是平行六面体(e_1,e_2,e_3)有最小体积。位移矢量为式(3.1)的平移操作称为基本平移，e_1,e_2,e_3称为基本平移的基矢。除基本平移外，点阵不可能有其它纯平移对称操作，所以基本平移群(或称点阵的格群）完整地刻画着点阵的平移对称性——即通常所说的周期性。基本平移位移矢量的集合$\{\boldsymbol{n}\}$生成一个三维点阵，称为布喇菲点阵(格子)，矢量$\boldsymbol{n}$称为格矢，它给出晶格的平移对称性(格群)一种直观的表现。但要注意布喇菲点阵$\{\boldsymbol{n}\}$与晶格点阵的区别：前者是对基本平移操作的一种几何表示；后者是指晶格质点的实际分布。按对称操作的定义不难看出，晶格点阵必须由一个布喇菲点阵或多个相同的布喇菲点阵平行套构而成。例如：氯化钠的晶格点阵中的氯离子和钠离子分别构成两个相同面心立方布喇菲格子，二者以等距离相间套构成氯化钠的晶格；金刚石的晶格也是由碳原子的两个相同面心立方布喇菲点阵套构而成，这两个点阵沿立方对角线方向拉开了1/4对角线长的距离。

在分析其它类型的对称操作之前，先引入一种表示空间操作的方便符号$(\alpha\,|\boldsymbol{t})$，其中$\alpha$表示这个空间操作关于原点的点操作部分，$\boldsymbol{t}$表示其平移部分的移动矢量。与(2.1)式比较，这里的α应为式(2.1)中的矩阵A，$\boldsymbol{t}$即式中的$\boldsymbol{t}$。由(2.1)式不难证明，在这种符号下，空间操作的乘法可写为

$$(\beta\,|\boldsymbol{t}')(\alpha\,|\boldsymbol{t})=(\beta\alpha|\,\beta\boldsymbol{t}+\boldsymbol{t}') \tag{3.2}$$

α、β是共点的点操作，其乘法运算法则已列于式(2.19)—(2.27)中。如以ε表示恒等点操作，则在此符号系统中$(\alpha\,|0)$、$(\varepsilon\,|\boldsymbol{t})$、$(\varepsilon\,|0)$将分表关于原点的点操作、纯平移、恒等操作。由式(3.2)可得

$$(\alpha|\,\boldsymbol{t})^{-1}=(\alpha^{-1}\,|-\alpha^{-1}\boldsymbol{t}) \tag{3.3}$$

晶格的基本平移应写为

$$(\varepsilon\,|\boldsymbol{n}) \tag{3.4}$$

又总可写

$$\boldsymbol{t}=t_1\boldsymbol{e}_1+t_2\boldsymbol{e}_2+t_3\boldsymbol{e}_3=t_1'\boldsymbol{e}_1+t_2'\boldsymbol{e}_2+t_3'\boldsymbol{e}_3+n_1\boldsymbol{e}_1+n_2\boldsymbol{e}_2+n_3\boldsymbol{e}_3=\boldsymbol{V}+\boldsymbol{n}$$

其中 t_i' 和 n_i 分表 t_i 的小数部分与整数部分。所以晶格空间对称操作的一般形式可写为

$$(\alpha\,|\boldsymbol{V}(\alpha)+\boldsymbol{n})=(\varepsilon\,|\boldsymbol{n})(\alpha\,|\boldsymbol{V}(\alpha)) \tag{3.5}$$

其中 $\boldsymbol{V}(\alpha)$ 在基本平移基矢下的分量是绝对值小于1的数，一般与点操作部分相关。特别的，因为在对称操作中的纯平移一定是基本平移，必有

$$\boldsymbol{V}(\varepsilon)=0 \tag{3.6}$$

(3.5)式表明，晶格的对称操作可以分为基本平移$(\varepsilon\,|\boldsymbol{n})$和$(\alpha|\,\boldsymbol{V}(\alpha))$ 两个部分。后一部分操作的几何意义可如下看出。当$\boldsymbol{V}(\alpha)=0$，$(\alpha|\,0)$退化为以原点为中心的点操作α；当$\boldsymbol{V}(\alpha)\neq0$，而$\alpha$是转动时，将它分解为平行于$\alpha$的转轴和垂直于$\alpha$的转轴的两个分量$\boldsymbol{V}(\alpha)=\boldsymbol{V}_{\parallel}(\alpha)+\boldsymbol{V}_{\perp}(\alpha)$，对照(2.6)式可看出，这时$(\alpha|\,\boldsymbol{V}(\alpha))$是一螺旋旋转：转角即$\alpha$的转角；转轴相对于$\alpha$的转轴有一平行移动，位移矢量$\boldsymbol{d}$由下式确定：

$$\alpha\boldsymbol{d}+\boldsymbol{V}_{\perp}(\alpha)=\boldsymbol{d}$$

注意，如将此式在以α的轴为z轴的直角坐标系中写出，结果相当于(2.6)式的脚注中关于$(d_1,\ d_2)$的方程式。螺旋位移矢量为$\boldsymbol{V}_{\parallel}(\alpha)$。当$\boldsymbol{V}(\alpha)\neq0$，而$\alpha$是旋转反映时，将它分解为沿转轴方向和映面方向的两个分量$\boldsymbol{V}(\alpha)=\boldsymbol{V}_{轴}(\alpha)+\boldsymbol{V}_{面}(\alpha)$，对照式(2.8)可知，这时$(\alpha\,|\boldsymbol{V}(\alpha))$也是一个旋转反映操作：转轴相对于$\alpha$的转轴有一平行移动，位移矢量$\boldsymbol{d}_{轴}$由下式确定

$$\alpha\boldsymbol{d}_{轴}+\boldsymbol{V}_{面}(\alpha)=\boldsymbol{d}_{轴}$$

映面相对于α的映面有一个平行移动，位移矢量$\boldsymbol{d}_{面}$为

$$\boldsymbol{d}_{面}=\boldsymbol{V}_{轴}(\alpha)/2$$

注意这时$(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha))$是与$\alpha$相似的一个点操作，只是中心由原点移到了$(\boldsymbol{d}_{轴}+\boldsymbol{d}_{面})$点。当$\boldsymbol{V}(\alpha)\neq 0$，而$\alpha$是反映时，将它分解为平行和垂直于映面的两部分 $\boldsymbol{V}(\alpha)=\boldsymbol{V}_{\parallel}(\alpha)+\boldsymbol{V}_{\perp}(\alpha)$，对照式(2.7)可知，这时$(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha))$为一滑移反映操作：映面相对于$\alpha$的映面有一平行移动，位移矢量为$\boldsymbol{V}_{\perp}(\alpha)/2$；滑移矢量为$\boldsymbol{V}_{\parallel}(\alpha)$。

总之，$(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha))$型的对称操作或为点操作或为螺旋旋转或滑移反映；在后两种情形中，轴或映面相对于α的轴或映面平移一个位移$\boldsymbol{d}$，其值由$\boldsymbol{V}_{\perp}(\alpha)$确定，而螺旋位移或滑移矢量则由$\boldsymbol{V}_{\parallel}(\alpha)$给出。

我们已将晶格点阵的对称操作分为基本平移和$(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha))$两种型式，但它们并非完全无关的，其间存在着一种相互制约的关系。利用式(3.2)和式(3.3)可得到

$$(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha))(\varepsilon|\boldsymbol{n})(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha))^{-1}=(\varepsilon|\alpha\boldsymbol{n}) \qquad (3.7)$$

这表明$(\varepsilon|\alpha\boldsymbol{n})$必为点阵的一个对称操作，它又是一个纯平移所以必须是基本平移。从而有

$$\alpha\boldsymbol{n}=\boldsymbol{n}'=n_1'\boldsymbol{e}_1+n_2'\boldsymbol{e}_2+n_3'\boldsymbol{e}_3 \qquad (3.8)$$

即晶格点阵对称操作中的点操作部分不改变其布喇菲点阵。这个定理在决定晶格点阵对称群的构造上具有重要作用。

现在我们回过头来进一步讨论$(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha))$型的操作可以成为晶格点阵对称操作的条件。由(3.8)式，点操作部分α的轴和映面的取向以及转角的取值都不能是随意的，(3.6)式使得$\boldsymbol{V}_{\parallel}(\alpha)$的取值也不能是随意的，它们都受到布喇菲格子的制约。

首先考虑轴和映面的取向。若α_0是绕一n次轴$\boldsymbol{a}$转动基本角的操作$C_n=C(\boldsymbol{a},2\pi/n)$，取$\boldsymbol{n}$为与$\boldsymbol{a}$不垂直的任一格矢，则

$$\sum_{m=1}^{n}\alpha_0^m\boldsymbol{n}$$

是一个在操作α_0下不变的非零矢量，必沿转轴$\boldsymbol{a}$的方向（用α_0作用此矢量只是改变$\sum$号内的求和次序）；另一方面，由式(3.8)知，这矢量必为一格矢，可见$\boldsymbol{a}$的方向必须是某一格矢的方向。对点操作部分的映轴或反轴的取向也有同样的限制条件。同样可证，点操作部分的映面必须沿某两个不共线的格矢的方向。总之，晶格对称操作的轴必须平行于布喇菲点阵的一个一維子阵，映面必须平行于布喇菲点阵的一个二維子阵。

其次考虑转角的取值限制。将式(3.8)用在基$\{e_1, e_2, e_3\}$下的矩阵形式表示（操作α的矩阵用A来表示）

$$A\begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_1' \\ n_2' \\ n_3' \end{pmatrix}$$

式中只要(n_1, n_2, n_3)为整数，(n_1', n_2', n_3')就必为整数，这要求A的阵元为整数，从而迹t_rA是整数。又，矩阵的迹在相似变换下不变，而A可以通过相似变换化为标准型(2.4)，于是得

$$t_rA = 2\cos\alpha \pm 1 = m$$

式中的α是操作α的转角，m表整数。从以上关于转角α的方程知，$\cos\alpha$只能取下列值之一：0，$\pm 1/2$，± 1。因而解为

$$\frac{\pi}{2}, \ \frac{3\pi}{2}, \ \frac{\pi}{3}, \ \frac{2\pi}{3}, \ \frac{4\pi}{3}, \ \frac{5\pi}{3}, \ 0, \ \pi$$

可见，晶格对称操作的各种轴的轴次只能为

$$n = 1, 2, 3, 4, 6 \qquad (3.9)$$

最后考虑螺旋旋转或滑移反映中的位移量$\boldsymbol{V}_{||}(\alpha)$的取值限制。对螺旋旋转，$\boldsymbol{V}_{||}(\alpha_0)$沿转动$\alpha_0$的转轴方向。如前所证，在这转轴方向上有一个一維点阵——布喇菲点阵的子阵，设此点阵的基矢为$\boldsymbol{\tau}$——由原点到沿该方向的相邻格点的矢量，即沿该方向的最小格矢，则可写

$$\boldsymbol{V}_{||}(\alpha_0) = c\boldsymbol{\tau} \qquad (3.10)$$

其中 $0<c<1$。又，

$$(\alpha_0|\boldsymbol{V}(\alpha_0))^n=(\alpha_0^n|n\boldsymbol{V}_{\|}(\alpha_0)+\sum_{m=1}^{n}\alpha_0^m\boldsymbol{V}_{\perp}(\alpha_0))$$

其中 $\alpha_0^n=\varepsilon$, $\sum_{m=1}^{n}\alpha_0^m\boldsymbol{V}_{\perp}(\alpha_0)$显然垂直于转轴且在$\alpha_0$下不变，故必为零矢量，所以有

$$(\alpha_0|\boldsymbol{V}(\alpha_0))^n=(\varepsilon|n\boldsymbol{V}_{\|}(\alpha_0))$$

此式也可由$(\alpha_0|\boldsymbol{V}(\alpha_0))$的几何意义立即写出。将式 (3.10) 代入便可看出，这要求 $nc\boldsymbol{\tau}$ 为一格矢，从而 nc 必为整数。注意到 c 只能在 0 和 1 之间取值，可得

$$c=\frac{1}{n},\ \frac{2}{n},\ \cdots,\ \frac{n-1}{n} \tag{3.11}$$

其中 n 为螺旋轴的轴次。式(3.10)和式(3.11)给出了与 n 次螺旋轴基本转角相应的螺旋位移的可能值。对滑移反映，有

$$(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha))^2=(\varepsilon|2\boldsymbol{V}_{\|}(\alpha))$$

这要求 $2\boldsymbol{V}_{\|}(\alpha)$是一格矢。由于 $\boldsymbol{V}_{\|}(\alpha)$分量的绝对值小于1，$2\boldsymbol{V}_{\|}(\alpha)$的分量的绝对值应小于 2，因而它必是沿 $\boldsymbol{V}_{\|}(\alpha)$方向的最小格矢，设为$\boldsymbol{\tau}'$，则有

$$\boldsymbol{V}_{\|}(\alpha)=\boldsymbol{\tau}'/2 \tag{3.12}$$

上式表明，滑移反映操作中的滑移矢量必为布喇菲点阵的一个一維子阵的基矢之半。

以上我们阐明了，作为离散点系的晶格点阵的平移对称群只能是格群；晶格对称操作的点操作部分必须使格矢的点阵复原；晶格对称操作的转轴、映轴（反轴）、螺旋轴的轴次只能取 2、3、4、6，轴的取向必平行于布喇菲点阵的一个一維子阵，与 n 次螺旋轴的基本转角相应的螺旋位移矢量只能取这子阵基矢的$1/n$、$2/n$、…、$(n-1)/n$倍；晶格的映面、滑移面的取向必平行于布喇菲点阵的一个二維子阵，滑移矢量只能取这二維子阵的一个一維子阵的基矢之半。

3.2 晶体点群

由（3.2）式可见，晶格对称操作的点操作部分（以共同的原点为中心）的全体对于点操作的乘法是封闭的，即任二点操作部分的乘积仍为某一对称操作的点操作部分；又，恒等点操作和任一点操作部分的逆也必为对称操作的点操作部分（式（3.4），（3.3））；乘法的结合律则显然是成立的。所以，晶格对称操作的点操作部分的集合成群，称为晶体点群。

晶体点群显然是晶格的布喇菲点阵的对称群，即当把晶体点群的不动点放在点阵的任意格点上时，点阵在此点群的操作下不变，见式（3.8）。但与格群不同，它一般并不是晶格点阵的对称群，除非晶格对称操作中的全部$\boldsymbol{V}(\alpha)=0$，因为只要有一个$\boldsymbol{V}(\alpha)\neq 0$，点操作$\alpha$就不是晶格的对称操作。晶体点群不论是不是晶格点阵的对称群，都足以描述晶体的宏观对称性。宏观上晶体可以看作是均匀的，晶体中各点上的性质只有微观（晶格常数尺度）方面的差别。因此，任何对称操作的平移部分都将被这种宏观均匀性所掩盖，使得平移操作的效果无异于恒等操作。换言之，晶格对称操作的点操作部分才具有宏观的特征。所以，晶体点群表现了晶体的宏观对称性，而且这点群的不动点取在晶体的任何点上都是等效的，它只反映了均匀晶体的各向异性。

我们能够利用晶体点群将晶体按其宏观对称性系统地分类，这也就是将晶体点群分类。由于在晶体点群中只能出现1、2、3、4和6次的轴，在C_n型的点群中只有C_1、C_2、C_3、C_4和C_6五个晶体点群；在D_n型中只有D_2、D_3、D_4、D_6四个晶体点群；在正多面体群中，T和O是晶体点群。共11个第一类晶体点群。同样的道理，在第二类点群中，有下面21个晶体点群：C_i，C_s，S_4，C_{2h}，C_{2v}，C_{3i}，C_{3h}，C_{3v}，C_{4h}，C_{4v}，C_{6h}，C_{6v}，D_{2h}，D_{2d}，D_{3d}，

$D_{3h}, D_{4h}, D_{6h}, T_h, T_d, O_h$。注意，$D_{4d}$ 含有 8 次映轴，D_{6d} 含有12次映轴，所以这两个点群不是晶体点群。共有 32 个晶体点群，因而晶体共有32种宏观对称类型。属于同一宏观对称类型，亦即具有同一点群的晶体，叫做一个晶类，32个晶类又可归并为七个晶系(同一晶系的晶类具有同一类型的布喇菲点阵，详见后)，如下表所示。

点对称级别	晶系名称	所包括的晶类
高级	立方	T, T_h, T_d, O, O_h
中级	六方	$C_6, C_{3h}, C_{6h}, C_{6v}, D_{3h}, D_6, D_{6h}$
	四方	$C_4, S_4, C_{4h}, C_{4v}, D_{2d}, D_4, D_{4h}$
	三方	$C_3, C_{3i}, C_{3v}, D_3, D_{3d}$
低级	正交	C_{2v}, D_2, D_{2h}
	单斜	C_2, C_s, C_{2h}
	三斜	C_1, C_i

晶体的物性常数，诸如弹性系数、热胀系数、介电(折射)常数或更复杂些的电光系数、弹光系数等等，由于晶体的各向异性特征，一般表现为张量。晶体的宏观对称性要求这些物性张量在晶体点群的对称操作下不变，这显然是对张量分量的取值和相互关系的一种限制，从而减少了独立分量数目，并常常使某些分量为零。所以，单由晶体所属晶类的点群出发，便可唯象地推断晶体物性张量的某些一般特征。例如，表现晶体光学性质的折射率椭球，必须在晶体点群的操作下不变，从而推知：立方晶系（高级对称）的折射率椭球必为球形，所以是各向同性的；六方、四方和三方晶系（中级对称）的折射率椭球必为

回转椭球，所以是单轴晶体；正交、单斜和三斜晶系（低级对称）的折射率椭球不受任何限制，一般为双轴晶体。再如，晶体的线性电光系数是三阶的张量，因而在反演操作下变号，当点群中含有反演操作时又要求它不变。从而推知，具有对称(反演)中心的晶体的线性电光系数全为零，所以不具有泡克耳效应，并可看出能产生泡克耳效应的晶类有20种。

3.3 格群与布喇菲格子

晶格点阵的平移对称性由基本平移 $(\varepsilon|\boldsymbol{n})$所构成的群$\{(\varepsilon|\boldsymbol{n})\}$，即格群来描述。每个基本平移由移动矢量（格矢）$\boldsymbol{n}$确定（两者一一对应），由平移操作的乘法

$$(\varepsilon|\boldsymbol{n})(\varepsilon|\boldsymbol{n}')=(\varepsilon|\boldsymbol{n}+\boldsymbol{n}')$$

知，格群内的乘法由相应格矢的加法来确定。所以也可以将格群理解为格矢$\boldsymbol{n}$的加法群$\{\boldsymbol{n}\}$（二者同构），它的几何图象便是布喇菲点阵。现在研究晶格平移对称性的各种类型，也就是将晶格按其平移对称性分类。我们看到，这个问题的数学提法不外是将格群或布喇菲格子进行分类。

由于晶格的布喇菲点阵在晶格所属晶类的点群操作下不变，点阵的可能型式必须受晶格所属晶类（点群）的制约，而不能全完随意。我们从立方晶系开始，考察其布喇菲点阵的平行六面体单位。所谓平行六面体单位是指在点阵中所取的一种以格点为顶点的平行六面体单元，用它在三个方向上无限重复可以生成整个点阵。这里所说的单元并不一定是最小的，即在所取的平行六面体上，除顶点外还可以有其他格点。让平行六面体单位的一个顶点（格点）为原点，过原点的三个棱矢量设为$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$，则六面体单位可由这三个棱矢来表征。如上所述，这三个棱矢一般不一定是点阵的基矢，仅当六面体单位是最小的时，它们才是点阵基矢。属于立方晶系的晶类（T、T_h、T_d、

O、O_h）有一共同特点：存在四个通过立方体对角线的三次轴。由此推知，沿四个轴存在四个一維子阵，且由于绕任一轴的转动可以使其余三个一維子阵位置互换，但整个点阵不变，这四个一維子阵必须是等间距的。如取四个子阵中与原点相邻的八个格点为顶点的平行六面体，则得到一种立方单位。反之，一个点阵如存在立方单位，则使其不变的最大点群必为O_h。可见，立方晶系的布喇菲格子的特征是存在立方单位。现在取最小的立方单位，则只有三种可能的型式：当立方体上除顶点外不存在其它格点时，称为简单立方单位；当立方体上除顶点外还有其它格点时，称为复式立方单位，而复式立方单位又有两种型式。复式立方单位的非顶点格点显然不能出现在最小立方单位的棱上，因为如一个棱上有一格点，相邻的另二棱上也必有与原点有同距离的格点，这三个棱矢将确定一个更小的立方单位。非顶点格点又不能出现在面心以外的面上；因为如有一个这样的格点出现在一个面上，则由于O_h对称性，将有四个或八个格点出现在每个面上，又連接任二格点的矢量都是格矢，这必导致棱上存在格点。同样，非顶点格点也不能出现在体心以外的体内，且面心与体心格点不能同时存在。因此，复式立方单位或者是面心型的，或者是体心型的。总之，立方晶系的布喇菲格子只有三种型式：简单立方、面心立方和体心立方，或简称立方P点阵、立方F点阵和立方I点阵。

用类似的方法，可以分析其余的六个晶系的布喇菲点阵类型[26]。对六方晶系，存在六方单位，而最小六方单位只有简单六方(P)一种。四方晶系，存在四方单位，其最小四方单位有简单四方(P)和体心四方(I)两种。三方晶系，存在三方单位和六方单位，最小三方单位只有简单三方(R)一种。正交晶系，存在正交单位，最小正交单位有简单正交(P)、底心正交(C)、面心正交(F)和体心正交(I)四种（对点群C_{2v}，还有

侧面心(A)；因为对于 C_{2v},(A)和(C)是不同型式)。单斜晶系，有单斜单位，最小单斜单位有简单单斜(P)和底心单斜(C)两种。三斜晶系，只有三斜单位，最小三斜单位只有简单三斜(P)一种。这样便得到11种布喇菲点阵类型，六方P；四方P，四方I；三方R；正交P，正交C，正交F，正交I；单斜P，单斜C；三斜P。

综上所述，与7个晶系相应有7种点阵单位和14种布喇菲格子，列于图3.1中。图中以$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$表示平行六面体单位的棱矢量，其间的夹角以γ、α、β表示。

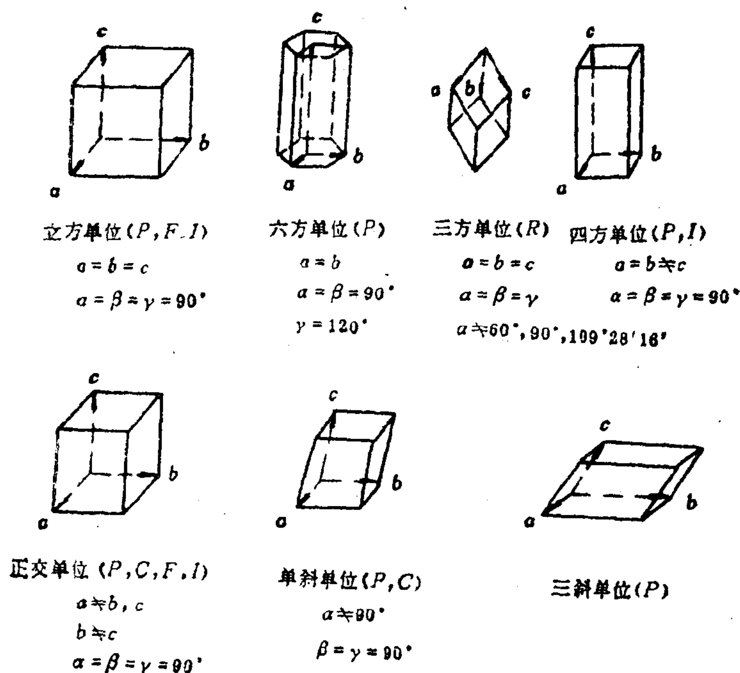


图 3.1 布喇菲格子的7种单位与14种类型

以上的分析表明，晶格点阵的平移对称类型共有14种，表现为14种布喇菲点阵，注意：当三方单位中的 $\alpha=90°$，$60°$和$109°28'16''$时，将分别生成立方P、F、I点阵。不同类型的点阵是以一定型式的最小平行六面体单位来表征的，也可以用点阵基矢的类型来表征。这14种平移对称类型分属7个晶系，而属于一定晶系的晶体的平移对称性只能在这14种型式中取几个特定类型。

3.4 晶体空间群（空间群）

晶格点阵的所有空间对称操作所成的群称为晶体空间群，简称空间群。它足以完全地刻画晶格点阵的几何（空间）对称性。前面研究过的格群是相应空间群的一个重要子群，只反映平行对称性。我们已经从几个角度讨论了将晶体按其对称型式进行分类的问题，但要进一步将晶体按其完全的空间对称性进行分类，就要研究晶格的空间群。如同晶体（宏观）点对称类型和晶格平移对称类型都是有限的一样，晶格的空间对称类型也是有限的，只有230种，即230个空间群。用演绎的方法来构造出所有这230个空间群是一件冗长而乏味的工作。我们只指出构造这些空间群的基本原则和思路，并说明其符号规则。这对于理解空间群的结构以及运用关于空间群的已知结论来说，已经足够。

空间群的所有性质可以由下述已知事实推出：空间群的纯平移子群为一格群$\{(\varepsilon|\boldsymbol{n})\}$，格矢的点阵$\{\boldsymbol{n}\}$在空间群的操作的点操作部分所成的点群$\{\alpha\}$下不变。从这一点出发，我们已经推知：(1)$\{\alpha\}$必为32个晶体点群之一；(2)$\{\boldsymbol{n}\}$必为14种布喇菲格子之一；(3)当$\{\alpha\}$属于某一晶系时，$\{\boldsymbol{n}\}$只能取属于该晶系的格子。现在可以进一步指出：(4)点群$\{\alpha\}$的对称元素（轴、面）相对于点阵$\{\boldsymbol{n}\}$的方位只能取某种（个别情况下

是两种）确定的关系。这一点也是{n}在{α}的操作之下不变所要求的。例如，当晶体属于立方晶系时，点群{α}必有四个沿立方对角线的3次轴，显然欲使立方(P、F、I)点阵在绕这些轴的转动下不变，这四个3次轴必沿点阵立方单位的对角线方向。其余对称元素相对于这四个轴的方位是完全确定的，不必另外考虑。类似地，可以确定其它晶系的点群对称元素相对于点阵的取向。少数特殊情况下，有两种可能的相对取向，一是六方晶系中的点群D_{3h}相对于六方P点阵的取向，其3次轴必须沿$\mathbf{c}$的方向，但一个2次轴可以沿$\mathbf{a}$或$(2\mathbf{a}+\mathbf{b})$方向；另一情况是四方晶系中的点群D_{2d}相对于四方(P、I)点阵的取向，其4次映轴必须沿$\mathbf{c}$方向，但一个2次轴可以沿$\mathbf{a}$或$(\mathbf{a}+\mathbf{b})$方向；再一种情况是三方晶系中的点群C_{3v}、D_3、D_{3d}相对于六方P点阵都有两种取向方位：3次轴都必须沿$\mathbf{c}$方向，但映面或2次轴则可沿$\mathbf{a}$或$(2\mathbf{a}+\mathbf{b})$方向。我们可以将空间群中点操作部分的点群和平移子群的所有可能的组合方式形式地表达如下：

立方晶系	$(T, T_h, T_d, O, O_h)\times(P, I, F)$	15种
六方晶系	$(C_6, C_{3h}, C_{6h}, C_{6v}, 2D_{3h}, D_6, D_{6h})\times(P)$	8种
四方晶系	$(C_4, S_4, C_{4h}, C_{4v}, 2D_{2d}, D_4, D_{4h})\times(P, I)$	16种
三方晶系	$(C_3, C_{3i}, C_{3v}, D_3, D_{3d})\times(R)$	
	$(C_3, C_{3i}, 2C_{3v}, 2D_3, 2D_{3d})\times(P)$	13种
正交晶系	$(D_2, D_{2h})\times(P, C, I, F)$	
	$(C_{2v})\times(P, C, A, I, F)$	13种
单斜晶系	$(C_2, C_s, C_{2h})\times(P, C)$	6种
三斜晶系	$(C_1, C_i)\times(P)$	2种

总共有73种组合方式。

利用上面的结果，可以系统地构造出所有的空间群。首先，将32个晶体点群按一切可能的方式与14种格群进行组合

$\{(\alpha|\boldsymbol{n})\}$，可以得到73个空间操作的集合。显然，每个集合$\{(\alpha|\boldsymbol{n})\}$形成一个空间群，其特点是以点群$\{\alpha\}$为子群，因而不含螺旋旋转和滑移反映操作，称为简单空间群。这样就由32种晶体点群和14种格群简便地生成73个简单空间群。在非简单的空间群中，其点操作部分的点群与格群的组合方式，必须属于上述73种组合方式之一，因为对称操作中的轴与面只能以上述方式相对于布喇菲格子取向。由此可见，非简单空间群与简单空间群的差别仅在于用螺旋轴取代相应的同次转轴，用滑移面取代相应的映面。对73个简单空间群进行所有允许的这种取代手续，可以得到 157 个不同的空间群[26]、[30]，这显然穷尽了所有非简单空间群。非简单空间群的特点是含有螺旋旋转或滑移反映操作，即在$\{(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha)+\boldsymbol{n})\}$中至少有一个$\alpha$的$\boldsymbol{V}(\alpha)\neq 0$，所以其点操作部分$\alpha$不全是群中的对称操作，即点群$\{\alpha\}$不是空间群的子群。这样总共有 230 个空间群。

空间群的常用符号系统有两种。一种是前面标记点群时已用过的熊夫利斯（Schonflies）符号。用这种符号标记空间群时，只是在所属晶类的点群符号上加以脚标，来区分具有相同点群的不同空间群。例如，立方晶系中属于晶类O_h的空间群共有10个，分别用符号O_h^1，O_h^2，…，O_h^{10}表示，其中O_h^1、O_h^5、O_h^9是简单的。还有一种更为合理的符号系统，称为国际符号。这种符号能够示明空间群的点群、格群以及与点群的点操作相联系的空间操作的螺旋轴和滑移面，从而能够充分地表示出空间群的结构。为了建立空间群的国际符号系统，先来建立晶体点群的国际符号。在国际符号中，用字母n表示n次转轴，$\bar{n}$表示n次反轴，字母m表示映面，用这些符号的组合表示点群。在组合中，各数字或字母出现的次序暗示着轴或面的法线相对于平行六面体单位（棱矢量为$\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}$）的方向，其规则由下表给出。

位序＼方向＼晶系	三斜	单斜	正交	四方	三方	六方	立方
1		$\boldsymbol{a}$	$\boldsymbol{a}$	$\mathbf{c}$	$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\mathbf{c}$	$\mathbf{c}$	$\boldsymbol{a}$
2			$\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{a}$	$\boldsymbol{a}-\mathbf{c}$	$\boldsymbol{a}$	$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\mathbf{c}$
3			$\mathbf{c}$	$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$		$2\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$

当某轴和一映面（法线）的方向重合时，两者的符号应该具有相同的位序，这时写为，例如$2/m$和$4/m$。可以点群T_d为例来说明国际符号的意义。T_d的国际符号是$\bar{4}3m$：第一个（位序为1的)符号$\bar{4}$表示$\boldsymbol{a}$方向存在一个4次反轴，第二个(位序为2）符号3表示（$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\mathbf{c}$）方向存在一个3次转轴，第三个符号（位序为3）$m$表示在垂直于（$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$）的方向存在一个映面。事实上，这三个符号不仅指出了点群具有以上三个对称元素，而且指出了点群的全部对称元素（对称元素系）。从这三个元素出发，由群性质和点操作的运算法则不难推断：在$\boldsymbol{b}$和$\mathbf{c}$方向各存在一个4次反轴；在（$-\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\mathbf{c}$)方向，($-\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}+\mathbf{c}$)方向，($\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}+\mathbf{c}$）方向各存在一个3次轴；在($\boldsymbol{b}+\mathbf{c}$)、($\mathbf{c}+\boldsymbol{a}$)、($\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$)、($\boldsymbol{b}-\mathbf{c}$)和($\mathbf{c}-\boldsymbol{a}$)方向(法线)各存在一个映面。所以，符号$\bar{4}3m$实际上给出了这个点群的全部对称元素（三个4次反轴，四个3次轴，六个映面，以及它们的方位），因而给出了它的全部对称操作（24个）。下面给出32个晶体点群的两种符号的对照表。根据国际符号作出32个晶体点群的对称元素系，是一个很好的练习。简单空间群的国际符号由它点群的国际符号和格群的类型符号联合组成，前者同时指明了所属的晶系，所以后者只须示明布喇菲格子是底心、面心、体心……

型即可。因此简单空间群的国际符号取为在点群国际符号的前面冠以符号P、C、I、F……的形式。例如O_h^1、O_h^5、O_h^9的国际符号分别为

$$P\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}、F\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}\text{和}I\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$$

关于非简单空间群，前面已经指出，它是由某个简单空间群中

C_1	C_i	C_2	C_s	C_{2h}	C_{2v}	D_2	D_{2h}
1	$\bar{1}$	2	m	$\frac{2}{m}$	$2mm$	222	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
C_3	C_{3i}	C_{3v}	D_3	D_{3d}	C_4	S_4	C_{4h}
3	$\bar{3}$	$3m$	32	$\bar{3}\frac{2}{m}$	4	$\bar{4}$	$\frac{4}{m}$
C_{4v}	D_{2d}	D_4	D_{4h}	C_6	C_{3h}	C_{6v}	C_{6h}
$4mm$	$\bar{4}2m$	422	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	6	$\bar{6}$	$6mm$	$\frac{6}{m}$
D_{3h}	D_6	D_{6h}	T	T_h	T_d	O	O_h
$\bar{6}2m$	622	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	23	$\frac{2}{m}\bar{3}$	$\bar{4}3m$	432	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$

若干点操作的对称元素被相应的螺旋轴或滑移面取代后形成的，因而它的国际符号也是由在相应的简单空间群的国际符号中进行相应的取代而形成的。为了进行这种代换，需建立关于螺旋轴和滑移面的适当符号。由于晶格的n次螺旋轴的平移量只能取$(n-1)$个不同的值(见式(3.11))，所以有$(n-1)$种n次

螺旋轴，分别记为 n_1，n_2，…，n_{n-1}。滑移面中的滑移量只能取式 (3.12) 的形式 $\boldsymbol{\tau}'/2$，如用布喇菲格子的平行六面体单位的棱矢表示，$\boldsymbol{\tau}'$ 可取值为 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$、$(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})$、$(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})$、$(\boldsymbol{c}+\boldsymbol{a})$、$(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})/2$、$(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})/2$、$(\boldsymbol{c}+\boldsymbol{a})/2$，相应的 5 种滑移面分别记为 a、b、c、n、d。这样，例如由简单空间群 $P\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$ 经允许（群律）的代换 $m\to n$ 和 $m\to n$，$4\to 4_2$ 和 $m\to n$，$4\to 4_2$ 和 $m\to n$ 所得到的非简单空间群的符号分别为 $P\frac{4}{n}\bar{3}\frac{4}{n}$，$P\frac{4_2}{m}\bar{3}\frac{2}{n}$，$P\frac{4_2}{n}\bar{3}\frac{2}{m}$。这就是 O_h^2，O_h^3，O_h^4。再如，非简单空间群 $I\frac{4_1}{a}(C_{4h}^6)$ 是由简单空间群 $I\frac{4}{m}(C_{4h}^5)$ 经代换 $4\to 4_1$ 和 $m\to a$ 形成的。空间群的这种符号系统显然是比较优越的，它不仅可以用来区分（标记）不同的空间群，而且同时给出了空间群的结构。关于晶体点群和空间群的符号系统，包括点群的极射赤面投影图和形态图等，可参阅[30]的九个附录。

§4 旋转对称性与旋转群

4.1 旋转对称

在§1中已经指出，任何孤立系的运动方程在空间的平移和旋转操作下都是严格不变的。量子力学所处理的问题，不少可以归结为在有心力場中的运动问题，例如关于原子和原子核的结构问题，这时体系的平移不变性显然被外場所破坏，但有心力場保留了相对于力心的旋转不变性。设 g 为保持力心不动的任一旋转操作，则所说的不变性可表为

$$V_{外}(\cdots g\boldsymbol{r}_i\cdots)=V_{外}(\cdots \boldsymbol{r}_i\cdots)$$

或

$$g\hat{H}=\hat{H}g$$

其中$\hat{H}$为体系的哈密顿算子，$\hat{g}$是g在态矢空间中的表现。所以旋转群$\{g\}=SO(3)$是这类体系的共同对称群，它描述着这类体系的旋转对称性。

大家在量子力学中已经熟悉了旋转对称的某些物理效果，例如它必然导致体系的角动量守恒以及与此相关的选择定则。但要系统地揭示旋转对称的物理效果以及这一对称所能提供的简化，则需要将体系的状态和力学量按旋转对称性进行分类；而关于旋转群$SO(3)$的数学理论，特别是表示论，便是进行此项分析的最有效的工具。当然，群$SO(3)$的重要性远不止于此，例如利用$SO(3)$的已知结果可以简化对以$SO(3)$为子群的一些更大的重要对称群的分析；此外，关于$SO(3)$的许多概念都将在李群的一般理论中出现，实际上$SO(3)$是研究得最详细的李群，因而可以将它看作是较抽象的李群一般理论的一个极好的具体例证。

4.2 旋转群的参数化

$SO(3)$由所有保持原点不动的旋转操作组成，可以看作是最大的第一类点群。与有限点群不同，它的操作不是一些分立的变换，而是可以连续变化的变换，因而需用连续变化的参数来标记。例如前面曾用转轴的方向$\boldsymbol{n}$和转角的大小α来标示一个转动$g(\boldsymbol{n},\alpha)$，方向$\boldsymbol{n}$可用在球坐标系下的方位角(θ, φ)来确定，这样便可用三个独立参数(θ,φ,α)来标示这个转动。注意到$g(\boldsymbol{n},\alpha)=g(-\boldsymbol{n},2\pi-\alpha)$，$\alpha$的变化范围可取为$0\leqslant\alpha\leqslant\pi$，转轴方位角的变化范围是$0\leqslant\theta\leqslant\pi$，$0\leqslant\varphi<2\pi$。引入适当的参数之后，群的操作之间的乘法就可以用参数的函数关系来表示。例如，乘法规则(2.24)不外乎是说存在一个确定的法则，由两个因子转动的参数$(\boldsymbol{n}_1,\alpha)$和$(\boldsymbol{n}_2,\beta)$可以得到乘积转动的参数$(\boldsymbol{n}_3,\gamma)$。这说明，乘积转动的参数是因子转

动参数的确定的函数，这个“乘法函数”的形式便决定着群内的乘法规则，它相当于有限群的乘法表。因此，如果引入了适当的参数，并找到了在此参数下的“乘法函数”，我们便可以离开群元的具体特性来研究群的结构和性质。就是说，可以将群元和它的参数等同地看待，可以将群和由“乘法函数”确定的参数群等同地看待。在这个意义下，称群被参数化了。参数化所带来的方便是，可以直接使用初等分析中的极限、連续等概念，特别是可以使用微分、积分等有力的分析工具（有限群只能用代数方法处理）。

$SO(3)$ 的参数的选择当然不是唯一的，例如也可以取为“转动矢量” $\boldsymbol{a}=a\boldsymbol{n}$ 的三个分量(a_1, a_2, a_3) 或三个欧拉角(φ, θ, ψ)（表示依次绕坐标轴$\boldsymbol{z}_0$，$\boldsymbol{y}_0$ 和 $\boldsymbol{z}_0$ 转角ψ，θ和φ的转动），物理学中常用的参数是后者。转动矢量α 的变化范围是半径为π的球体，由于$g(\boldsymbol{n},\pi)=g(-\boldsymbol{n},\pi)$，球面上共直径的两点标示同一个转动，如将这样的点对算作是一个点，我们便有群 $SO(3)$ 的操作与这个“球”上点之间的一一对应关系。在三維空间中将球面上每两个共直径的点粘合是无法实现的，这里的三維“球”可理解为高維空间中的一个三維封闭曲面。欧拉角的变化范围是

$$0\leqslant\psi<2\pi, \quad 0\leqslant\theta\leqslant\pi, \quad 0\leqslant\varphi<2\pi$$

当$\theta=0$时，$(\varphi+\psi)$ 值相同的不同(φ,ψ)代表同一个转动——绕$\boldsymbol{z}_0$转 $(\varphi+\psi)$ 角；当$\theta=\pi$时，$(\varphi-\psi)$值相同的不同 (φ,ψ) 代表同一个转动——绕$\boldsymbol{z}_0$转 $(\varphi-\psi)$ 角，再绕$\boldsymbol{y}_0$转π角；其他的不同参数值代表不同的转动，即那些转动的参数是单值的。这些非单值的参数点的存在，显然是不方便的，特别是它们出现于恒等操作（$SO(3)$ 的单位元）的邻域内，更不适于对 $SO(3)$ 进行局部地分析（参数α沒有这个缺点）；但不难看出，这些点的集合的維数是小于3的，因而在

对群元（体积）进行求和（积分）时，这些点是不起作用的。所以尽管欧拉角有以上的缺欠，但作为 $SO(3)$ 的整体参数还是可取的。

我们看到，按其代数性质来说，$SO(3)$ 成群；按其拓扑性质来说，$SO(3)$ 又可看作是一个三維闭曲面，每组参数便是这个曲面上的一组曲线坐标。群参数的不同选取也就是曲面上坐标系的不同选择。

4.3 旋转群的矩阵表示

旋转操作是普通三維空间中的线性变换，因而可用任意基矢下的矩阵形式来明显地表示。在任意正交归一基下，旋转矩阵是行列式为 +1 的正交矩阵，特别地，绕三个坐标轴转动的矩阵为

$$g(\boldsymbol{x}_0,\alpha)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha\\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha\end{pmatrix} \tag{4.1}$$

$$g(\boldsymbol{y}_0,\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & 0 & \sin\alpha\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\alpha & 0 & \cos\alpha\end{pmatrix} \tag{4.2}$$

$$g(\boldsymbol{z}_0,\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & \sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{4.3}$$

由此易写出欧拉角为 (φ,θ,ψ) 的转动矩阵为

$$g(\boldsymbol{z}_0,\varphi)g(\boldsymbol{y}_0,\theta)g(\boldsymbol{z}_0,\psi)=$$

$$\begin{pmatrix}\cos\varphi\cos\theta\cos\psi-\sin\varphi\sin\psi & -\cos\varphi\cos\theta\sin\varphi-\sin\varphi\cos\psi & \cos\varphi\sin\theta\\ \sin\varphi\cos\theta\cos\psi+\cos\varphi\sin\psi & -\sin\varphi\cos\theta\sin\psi+\cos\varphi\cos\psi & \sin\varphi\sin\theta\\ -\sin\theta\cos\psi & \sin\theta\sin\psi & \cos\theta\end{pmatrix} \tag{4.4}$$

又由点操作的运算法则(2.27)知

$$g(\boldsymbol{n},\alpha)=hg(\boldsymbol{z}_0,\alpha)h^{-1}$$

其中 h 为任一将$\boldsymbol{z}_0$变为 $\boldsymbol{n}$ 的转动 ($h\boldsymbol{z}_0=\boldsymbol{n}$)。设 $\boldsymbol{n}$ 在球坐标系下的方位角为θ,φ，则 h 显然可取为

$$h=g(\boldsymbol{z}_0,\varphi)g(\boldsymbol{y}_0,\theta)$$

这样可借助式(4.2)和(4.3)求得一般转动$g(\boldsymbol{n},\alpha)$的矩阵为

$$g(\boldsymbol{n},\alpha)=g(\boldsymbol{z}_0,\varphi)g(\boldsymbol{y}_0,\theta)g(\boldsymbol{z}_0,\alpha)g(\boldsymbol{y}_0,-\theta)\cdot g(\boldsymbol{z}_0,-\varphi) \quad (4.5)$$

不难看出，每个3×3的实正交幺模（行列式为+1的）矩阵都表示一个转动，每个这样的矩阵都能通过相似变换化为标准型（4.3)。所以，旋转群也可以看作是三維实正交幺模矩阵群，这正是符号 $SO(3)$ 的直接含意。3×3的实矩阵有九个实数元素，正交性条件对这九个元素形成六个独立的约束条件，例如，三个行向量都是归一的，每两个都正交，因而有三个可以独立变化的实参数，所以旋转群是三維的。这一点，前面已在几何表述下得到了。当三个欧拉角取遍所有可取值时，矩阵(4.4)将取遍所有3×3的幺模实正交矩阵。

4.4 旋转矩阵的指数形式

为了将旋转矩阵对参数的依赖关系写成比较简捷的指数形式，先来计算旋转矩阵 $g(\boldsymbol{n},\alpha)$ 对转角 α 的导数，有

$$\frac{g(\boldsymbol{n},\alpha+\Delta\alpha)-g(\boldsymbol{n},\alpha)}{\Delta\alpha}=\frac{g(\boldsymbol{n},\Delta\alpha)-I}{\Delta\alpha}g(\boldsymbol{n},\alpha)$$

其中 I 表单位矩阵，并注意到转动的乘法规则(2.23)，$g(\boldsymbol{n},\alpha+\Delta\alpha)=g(\boldsymbol{n},\Delta\alpha)g(\boldsymbol{n},\alpha)$。令 $\alpha\to0$ 得：

$$\frac{d}{d\alpha}g(\boldsymbol{n},\alpha)=I_{\boldsymbol{n}}g(\boldsymbol{n},\alpha) \quad (4.6)$$

上式中的$I_n = \frac{d}{d\alpha} g(\boldsymbol{n}, \alpha)|_{\alpha=0}$。方程(4.6)在初值条件$g(\boldsymbol{n}, 0) = I$下的解为

$$g(\boldsymbol{n}, \alpha) = e^{I_n \alpha} \tag{4.7}$$

与算子一样，矩阵的指数函数也是用无穷级数（1.8）式来定义的。容易直接验证，(4.7)式满足(4.6)式及初值条件。另一方面，我们也可用转动矢量$\boldsymbol{\alpha} = \alpha \boldsymbol{n}$的分量作为$g$的参数，这时可写

$$\frac{d}{d\alpha} = \frac{d\alpha_1}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial \alpha_1} + \frac{d\alpha_2}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial \alpha_2} + \frac{d\alpha_3}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial \alpha_3}$$

$$= n_1 \frac{\partial}{\partial \alpha_1} + n_2 \frac{\partial}{\partial \alpha_2} + n_3 \frac{\partial}{\partial \alpha_3}$$

所以有

$$I_n = n_1 I_1 + n_2 I_2 + n_3 I_3 = \boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{n}$$

其中$I_i = \frac{\partial}{\partial \alpha_i} g|_{\alpha=0}$可由式(4.1)–(4.3)计算

$$I_1 = \frac{\partial}{\partial \alpha_1} g|_{\alpha=0} = \frac{\partial}{\partial \alpha_1} g(\alpha_1, 0, 0)|_{\alpha_1=0} = \frac{\partial}{\partial \alpha_1} g(\boldsymbol{x}_0, \alpha_1)|_{\alpha_1=0},$$

$$I_2 = \frac{\partial}{\partial \alpha_2} g(\boldsymbol{y}_0, \alpha_2)|_{\alpha_2=0}, \quad I_3 = \frac{\partial}{\partial \alpha_3} g(\boldsymbol{z}_0, \alpha_3)|_{\alpha_3=0}$$

经简单的微分运算得

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$I_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

代入式(4.7)，得

$$g(\boldsymbol{n},\alpha)=e^{I_1\alpha_1+I_2\alpha_2+I_3\alpha_3}=e^{\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{\alpha}} \tag{4.9}$$

式(4.8)和(4.9)给出了以α为参数时转动矩阵的指数形式，值得注意的是指数部分对参数的依赖是线性的。作为特例，式(4.1)—(4.3)的特殊转动的矩阵可写为

$$g(\boldsymbol{x}_0,\alpha)=e^{I_1\alpha},\quad g(\boldsymbol{y}_0,\alpha)=e^{I_2\alpha},$$
$$g(\boldsymbol{z}_0,\alpha)=e^{I_3\alpha} \tag{4.10}$$

从而欧拉角为(φ,θ,ψ)的转动矩阵(4.4)为

$$g(\varphi,\theta,\psi)=e^{I_3\varphi}e^{I_2\theta}e^{I_3\psi} \tag{4.11}$$

3×3的矩阵有九个分量，可以看作是九維线性空间中的矢量。由式(4.8)可见，3个九維矢量I_1,I_2和I_3是线性无关的，从而它们张成一个三維的线性子空间$[I_1,I_2,I_3]$，这3个矢量形成该子空间的基。式(4.9)给出了转动矩阵与线性空间$[I_1,I_2,I_3]$中的矢量之间的一种对应关系，在恒等转动($\alpha=0$)的邻域内，它是一一对应的。为了明确两个转动的乘积在空间$[I_1,I_2,I_3]$中所对应的矢量，需将

$$e^{\sum_i I_i\alpha_i}\ e^{\sum_i I_i\beta_i}\ \text{写成}\ e^{\sum_k I_k\gamma_k}\ \text{的形状。}$$

为此，有下列的矩阵公式

$$e^Ae^B=e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]-\frac{1}{12}[B,[B,A]]+\cdots} \tag{4.12}$$

其中A，B是任二同阶方阵，而

$$[A,B]=AB-BA \tag{4.13}$$

注意到

$$[I_1,I_2]=I_3,\ [I_2,I_3]=I_1,\ [I_3,I_1]=I_2 \tag{4.14}$$

可得

$$[\sum_i I_i\alpha_i,\ \sum_j I_j\beta_j]=\sum_{ij}[I_i,I_j]\alpha_i\beta_j$$

$$=\sum_k I_k\sum_{ij}\varepsilon_{ijk}\alpha_i\beta_j$$

符号 ε_{ijk} 对三个下标是反对称的，且 $\varepsilon_{123}=1$。由这个定义可知，$\varepsilon_{231}=\varepsilon_{312}=\varepsilon_{123}=1$，$\varepsilon_{132}=\varepsilon_{321}=\varepsilon_{213}=-1$，其余分量因至少有两个下标相同，都是零。于是，利用式(4.12)可以写出

$$e^{\sum_i I_i\alpha_i}e^{\sum_j I_j\beta_j}=e^{\sum_k I_k(\alpha_k+\beta_k+\frac{1}{2}\sum_{ij}\varepsilon_{ijk}\alpha_i\beta_j+\cdots)}$$

或写为

$$\begin{cases} e^{\sum_i I_i\alpha_i}e^{\sum_j I_j\beta_j}=e^{\sum_k I_k\gamma_k} \\ \gamma_k=f_k(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3;\ \beta_1,\beta_2,\beta_3)=\alpha_k+\beta_k+\frac{1}{2}\sum_{ij}\varepsilon_{ijk}\alpha_i\beta_j+\cdots \end{cases} \tag{4.15}$$

上式中的函数 $f_k(k=1,2,3)$便是 $SO(3)$ 在所取参数（转动矢量）下的乘法函数，我们看到，这些函数是解析的。式(4.15)还表明，$SO(3)$ 乘法函数的形式由常数 ε_{ijk} 确定，所以这些常数决定着群 $SO(3)$ 的结构，称为群的结构常数。这就使我们能够把对于群 $SO(3)$ 的讨论转移到空间 $[I_1,I_2,I_3]$ 中去进行，这个空间中的矢量是3×3的矩阵，群的乘法在这个空间中由对易关系

$$[I_i,I_j]=\sum_k\varepsilon_{ijk}I_k \tag{(14)}$$

确定。这个特殊的矩阵空间称为 $SO(3)$ 的李代数。一般地说，李群的结构以比较简单的方式反映在李群的李代数中。因而李代数是研究李群的十分有效的工具。

4.5 旋转群上的不变积分

设 $\varphi(g)$ 是在群G上定义的函数（实值的或复值的），考

虑将这个函数对群元 g 求和的运算。对有限群的情形，这很简单，并有

$$\sum_{g\in G}\varphi(g)=\sum_{g\in G}\varphi(hg)=\sum_{g\in G}\varphi(gh) \qquad (4.16)$$

其中 h 是 G 的任一元。式(4.16)所示的性质是由于，当 g 取遍 G 时，hg 和 gh 也分别取遍 G，不同的写法只相当于调换一下对群元求和的次序，其值显然不变。但 $SO(3)$ 是連续的无限群，这时对群元求和的精确意义需要进一步明确。显然应用对連续参数的积分来代替(4.16)式中的有限求和。为此必须明确在所取参数下的群体积元的表达式，如取欧拉角为参数时

$$dg=w(\varphi,\theta,\psi)d\varphi d\theta d\psi \qquad (4.17)$$

中的函数 w 应具体给出。用脱离参数（坐标系）的一般术语来说，就是要在作为三維闭曲面的 $SO(3)$ 上定义一种测度（体积）。我们要求这种测度使得在对群的函数求和（积分）时，具有性质(4.16)，于是

$$\int_G\varphi(g)dg=\int_G\varphi(hg)dg=\int_G\varphi(gh)dg \qquad (4.18)$$

这种和式称为群 $G(=SO(3))$ 上的不变积分。要使条件(4.18)对任意連续函数 φ 都成立，必须有（下式是(4.18)式成立的充要条件）

$$\int_{\Delta g}dg=\int_{h\Delta g}dg=\int_{\Delta g h}dg \qquad (4.19)$$

其中 Δg 代表 $SO(3)$ 上的任一个区域，$h\Delta g$ 代表 Δg 中的所有元用 h 左乘后所得的区域，亦即 Δg 用 h 左乘的像，Δgh 是 Δg 用 h 右乘的像。式(4.19)表示群中任意区域的体积在群元的左乘和右乘下都是不变的，也就是说 dg 在 $SO(3)$ 上定义了一个不变的测度。

下面我们按(4.17)的不变性要求来确定函数 w 的形式，从而具体地作出 $SO(3)$ 上的一个不变测度。

式(4.17)中的 dg 既可表示坐标值介于 $(\varphi—\varphi+d\varphi, \theta—\theta+d\theta, \psi—\psi+d\psi)$ 内的群元所成的区域，也可表示这个区域的体积。这样，左不变性的要求可以表为

$$dg=g^{-1}dg \tag{4.20}$$

其中 g 是坐标为 (φ,θ,ψ) 的元，属于 dg。g^{-1} 的作用在于将 g 搬到单位元 $e(\varphi=0,\theta=0,\psi=0)$ 处，将 g 的邻域 dg 也搬到 e 的邻域。不变性要求搬动前后的体积相等，故有上式。相反地，由上式也可推断 dg 的左不变性

$$hdg=(hg)^{-1}(hdg)=g^{-1}h^{-1}(hdg)=g^{-1}dg=dg$$

(4.20)式表明，任意元邻域的体积应当用它在单位元处（左）像的体积来定义。问题归结为如何定义 $g^{-1}dg$ 的体积。先定出区域 $g^{-1}dg$，它是区域 dg 的 g^{-1} 像。由于在 e 的邻域内欧拉角不是单值的，所以不能使用欧拉角，可用单值的坐标 $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$。$dg$ 可以看作一个无穷小的平行六面体，它的三个棱矢量公共起点的坐标为 (φ,θ,ψ)，终端坐标则分别为 $(\varphi+d\varphi, \theta,\psi)$，$(\varphi,\theta+d\theta,\psi)$ 和 $(\varphi,\theta,\psi+d\psi)$（见图 4.1）。这个点的 g^{-1} 像的 α 坐标可如下确定：$g^{-1}g=e$ 的 α 坐标显然为 $(0,0,0)$，第二个点 $g(\varphi+d\varphi,\theta,\psi)=e^{I_3(\varphi+d\varphi)}e^{I_3\psi}$ 的 g^{-1} 像为

$$e^{-I_3\psi}e^{-I_2\theta}e^{-I_3\varphi}e^{I_3(\varphi+d\varphi)}e^{I_2\theta}e^{I_3\psi}$$
$$=e^{-I_3\psi}e^{-I_2\theta}e^{I_3d\varphi}e^{I_2\theta}e^{I_3\psi}$$

利用 $g(\boldsymbol{n},\alpha)=e^{\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{n}\alpha}$ 可将公式 (2.27) 改写为

$$g_0e^{\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{n}\alpha}g_0^{-1}=e^{\boldsymbol{I}\cdot g_0\boldsymbol{n}\alpha} \tag{4.21}$$

由此前式可写成

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}_0,-\psi)g(\boldsymbol{y}_0,-\theta)e^{\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{z}_0d\varphi}g^{-1}(\boldsymbol{y}_0,-\theta)g^{-1}(\boldsymbol{z}_0,-\psi)$$
$$=e^{\boldsymbol{I}\cdot g(\boldsymbol{z}_0,-\psi)g(\boldsymbol{y}_0,-\theta)\boldsymbol{z}_0d\varphi}$$

$$=e^{I\cdot(-\sin\theta\cos\psi x_0+\sin\theta\sin\psi y_0+\cos\theta z_0)\cdot d\varphi}$$

$$=e^{-I_1\sin\theta\cos\psi d\varphi+I_2\sin\theta\sin\psi d\varphi+I_3\cos\theta d\varphi}$$

可见它的α坐标为

$$(-\sin\theta\cos\psi d\varphi,\ \sin\theta\sin\psi d\varphi,\ \cos\theta d\varphi)$$

用同样的方法可以导出其余两点g^{-1}像的α坐标$(\sin\psi d\theta, \cos\psi d\theta, 0)$和$(0,0,d\psi)$。由于变换$g^{-1}$的单值连续性，$g^{-1}dg$也应是一无穷小平行六面体，它的三个棱矢的共同起点和三个端点的α坐标便是上面所算出的值（见图4.1）。

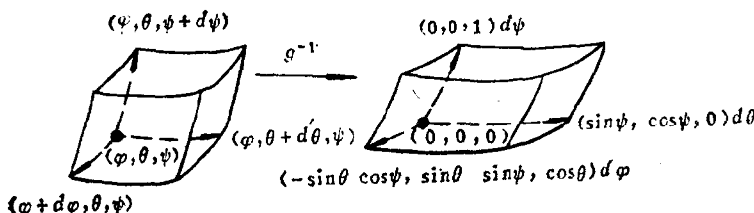


图 4.1

这个平行六面体的体积，应当由三个棱矢的混合乘积确定。如果$SO(3)$在单位元e处的度规张量为l_{ij}，则这混合矢积为棱矢分量的行列式乘以$\sqrt{l}$，l表张量l_{ij}的行列式。由于l_{ij}是待定的，此处的$\sqrt{l}$实际上是一可任选的正实数。取$\sqrt{l}=1$，得

$$g^{-1}dg=\left|\det\begin{pmatrix}-\sin\theta\cos\psi d\varphi & \sin\theta\sin\psi d\varphi & \cos\theta d\varphi\\ \sin\psi d\theta & \cos\psi d\theta & 0\\ 0 & 0 & d\psi\end{pmatrix}\right|$$

由(4.20)式得

$$dg=\left|\det\begin{pmatrix}-\sin\theta\cos\psi & \sin\theta\sin\psi & \cos\theta\\ \sin\psi & \cos\psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\right|d\varphi d\theta d\psi$$

$$=\sin\theta d\varphi d\theta d\psi \tag{4.22}$$

以上的讨论表明，上式定义了 $SO(3)$ 的一个左不变测度。同样可证，这个测度也是右不变的。所以，(4.22) 式是 $SO(3)$ 上的一个不变测度，它给出以欧拉角为参数的体积元的表达式。

由(4.22)式可以计算群 $SO(3)$ 的体积

$$V=\int_{SO(3)}dg=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sin\theta d\varphi d\theta d\psi=8\pi^2 \tag{4.23}$$

§5 置换对称性与置换群

5.1 置换群

前面已经说过，在交换多粒子体系中的相同粒子（交换其全部变数）时，体系的哈密顿量不会改变，也就是说全同粒子的置换变换是体系严格的对称变换。这种对称性可称为置换对称，相应的对称群称为置换群。借助置换群的表明理论，能够将多粒子体系的状态按置换对称性进行系统地分类，并可提供全同粒子体系的总对称或总反对称波函数的一种构造方法。所以置换群对于全同粒子体系的量子力学具有特殊的重要性，此外，置换群的表示理论也为线性（矩阵）李群的研究（纯代数方法）提供了另一种有效的工具。

置换的概念可以在更一般的意义下来讨论。设有 n 个对象，考虑将每个对象变为另一对象（也可以变为自己），且将不同对象变为不同对象的变换，则把第 i 个对象变为第 s_i 个对

象的变换可以记为

$$s: i \to s_i \tag{5.1}$$

或

$$s=\begin{pmatrix} 1 & 2\cdots n \\ s_1 & s_2\cdots s_n \end{pmatrix} \tag{5.2}$$

而$(s_1, s_2, \cdots, s_n)$不过是数码$(1,2,\cdots,n)$的重新排列。上述变换(5.2)式称为一个n次置换，显然不同的n次置换共有$n!$个，而这$n!$个置换构成一个群。其中置换的乘法是由相应变换的乘法连续施行来定义的，例如

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

容易验证，群中的单位元是恒等置换。

$$\begin{pmatrix} 1 & 2\cdots n \\ 1 & 2\cdots n \end{pmatrix}$$

每个n次置换的逆置换显然也是一个n次置换，例如

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 3 & 1 \end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

乘法的结合律和封闭性是明显的。n次置换的群记为S_n。例如，3次置换的群S_3共有6个元素，它们是

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

利用乘法的定义不难作出S_3的乘法表。如果将S_3的置换对象取为平面等边三角形的三个顶点，则S_3的六个置换的效果可以分别由点群C_{3v}的六个操作来完成，并且与两个置换之积相联系的操作是两个相应的操作之积。由此可知，S_3与C_{3v}有相同的乘法表（同构），见2.3节之例1。

5.2 置换的轮换表示

如果一个置换 s 顺次将 i_1 变为 i_2，i_2 变为 $i_3, \cdots, i_{k-1}$ 变为 i_k（这 k 个数码互不相同），最后又将 i_k 变为 i_1，而其余的数码都不变；则称为一个 k 项轮换。这是一种特殊的循环置换，可简记为

$$s=(i_1\ i_2\cdots i_k) \tag{5.3}$$

例如 n 次置换的 3 项转换(1 3 2)是指下列的循环置换

$$(1\ 3\ 2)=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\cdots n\\ 3 & 1 & 2 & 4\cdots n\end{pmatrix}$$

一个给定的轮换的记法不是唯一的，(5.3) 式中的数码只要保持循环的顺序不变，可以从任何一个数码写起。例如

$$(1\ 3\ 2)=(3\ 2\ 1)=(2\ 1\ 3)$$

代表同一个循环置换。两个轮换如果不含共同的数码，则称为是彼此独立的。彼此独立的轮换显然是可以对易的，例如

$$(1\ 3\ 4)(2\ 5)=(2\ 5)(1\ 3\ 4)$$

设 s 是任意 n 次置换，取其中的任意一个数码 i_1，若 s 将 i_1 变为 i_2，i_2 变为 $i_3, \cdots$，因 s 中又只有 n 个不同的数码，这个序列不可能不重复前面的数码，故总要出现例如将 i_k 变为 i_1 的情况；再在这 k 个数码之外任取 s 的一个数码 j_1，设 s 将 j_1 变为 j_2，j_2 变为 $j_3, \cdots, j_l$ 变为 j_1。这个程序进行下去势必穷尽 s 的全部 n 个数码，而 s 可以写为

$$s=(i_1\cdots i_k)(j_1\cdots j_l)\cdots \tag{5.4}$$

这就证明了：任意一个置换总可以分解为两两相互独立的轮换的乘积，而且这种分解是唯一的。注意，式 (5.4) 中各个轮换在乘积中出现的次序是随意的，因为它们可以对易。例如有

$$\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6\\ 4 & 6 & 1 & 3 & 5 & 2\end{pmatrix}=(1\ 4\ 3)(2\ 6)(5)$$

将置换写为轮换乘积的形式，在书写上和乘法的具体计算上都是比较简便的，读者可举些例子进行比较。

除了恒等置换以外，最简单的置换是2项轮换，称为对换。每一个轮换（除单位置换——即1项轮换外）都可以分解为对换的乘积，事实上易验证

$$(i_1 i_2 \cdots i_k)=(i_1 i_k)(i_1 i_{k-1})\cdots(i_1 i_2) \qquad (5.5)$$

所以任一置换也都可以分解为若干个对换的乘积。但这种分解方法并不是唯一的，例如

$$(1\ 2\ 3)=(1\ 3)(1\ 2)=(1\ 2)(2\ 3)$$

不过，一个置换分解为对换的乘积时，所含对换数目的奇偶性则是唯一确定的，因为这与置换的第二行$(s_1 s_2 \cdots s_n)$所含反序数的奇偶性相同。这一点可如下看出：置换的第二行可以看作是将置换作用于其中第一行数码$(1\ 2 \cdots n)$的结果；而每一个对换因子作用于n个数的序列时，必改变序列反序数的奇偶性。于是，我们能够将所有n次置换分为两大类：可以分解为偶数个对换乘积的称为偶置换，可以分解为奇数个对换乘积的称为奇置换。显然，在S_n中奇置换与偶置换各占一半（$n!/2$个），而且偶置换的全体构成S_n的子群，称为交代群，通常记作A_n。例如 $A_3=\{(1),(1\ 2\ 3),\ (1\ 3\ 2)\}$

不难看出，A_3与C_3有相同的乘法表（同构）。

5.3 置换的循环结构

在置换的轮换表示中，各项轮换出现的次数称为置换的循环结构。设在n次置换s的轮换分解式中，1项轮换有ν_1个，2项轮换中有ν_2个，…，n项轮换有ν_n个，则s的循环结构可记为

$$(\nu)=(\nu_1,\nu_2,\cdots,\nu_n) \qquad (5.6)$$

显然ν必须满足

$$\nu_1+2\nu_2+\cdots+n\nu_n=n \tag{5.7}$$

这里需注意，在置换的轮换表示的通常记法中，常将1项轮换略去不写；但在考虑置换的循环结构时必须对1项轮换记数，这时ν_1应为置换中保持不变的数码的个数。例如置换

$$\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7&8\\5&2&8&7&6&1&4&3\end{pmatrix}=(1\ 5\ 6)(3\ 8)(4\ 7)(2)$$

的循环结构为$\nu_1=1,\nu_2=2,\nu_3=1,\nu_4=\cdots=\nu_8=0$，故可写

$$(\nu)=(1,2,1,0,0,0,0,0)$$

显然满足

$$\sum_{i=1}^{8} i\nu_i=8$$

我们可以将群S_n中的全部置换按其循环结构进行分类，使有相同循环结构的置换归为一类。这样，S_n的类可以用(ν)来标记，而(ν)由方程(5.7)的解给出。不难证明，S_n中属于类(ν)的置换的个数为

$$n(\nu)=\frac{n!}{1^{\nu_1}\nu_1!\,2^{\nu_2}\nu_2!\cdots n^{\nu_n}\nu_n!} \tag{5.8}$$

例如S_3的六个置换表示可写为

$(1)(2)(3)$；$(1\ 2\ 3),(1\ 3\ 2)$；$(1\ 2)(3)$，

$(2\ 3)(1)$，$(1\ 3)(2)$

可见它们可分为三个类，其循环结构分别为

$(3,0,0)$，$(0,0,1)$，$(1,1,0)$

这是方程

$$\nu_1+2\nu_2+3\nu_3=3$$

仅有的三个解。这三类中的置换数分别为1，2，3（可验证式(5.8)）。

置换的循环结构也可以用另一种方法来标记，为此用另一组数λ来代替ν

$$\begin{cases} \lambda_1 = \nu_1 + \nu_2 + \cdots + \nu_n \\ \lambda_2 = \nu_2 + \nu_3 + \cdots + \nu_n \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \lambda_n = \nu_n \end{cases}$$

$$\begin{cases} \nu_1 = \lambda_1 - \lambda_2 \\ \nu_2 = \lambda_2 - \lambda_3 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ \nu_n = \lambda_n \end{cases} \tag{5.9}$$

式(5.9)给出了λ和ν的一一对应关系。可见，置换的类也能用数组

$$[\lambda] = [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n] \tag{5.10}$$

来标记，而λ必须满足

$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant 0 \tag{5.11}$$

和

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n = n \tag{5.12}$$

式(5.12)和(5.11)表明，每组λ值由自然数n的每个分割确定。所以n次置换的类（循环结构）可以用数n的分割来确定。分割$[\lambda]$又可用一种由n个方框构成的框图来表示：将λ_1个方框排在第一行，λ_2个方框排在第二行，…。例如群S_3的类可表为

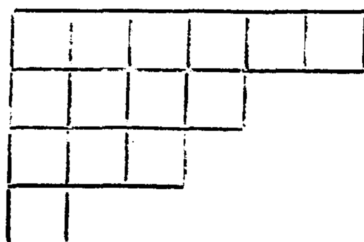
[3,0,0]　　[2,1,0,]　　[1,1,1]

分割的记号常作如下简化，例如

[3,0,0]=[3]，[2,1,0]=[2,1]，

$$[1,1,1]=[1^3]$$

等等。利用框图能够很快地作出方程(5.11)，(5.12)的解（当 n 不大时），从而能够简便地确定 S_n 的所有类。由(5.9)式可以看出：框图的每个列对应一个轮换，轮换的项数等于列中的方框个数，框图所标记的类中的置换就由这样一些轮换之积组成。例如在 S_{14} 的类



$$[\lambda]=[6,4,3,1]$$

中的置换由一个 4 项轮换、二个 3 项轮换、一个 2 项轮换和二个 1 项轮换组成，所以这个类也可用 ν 记号写为

$$(\nu)=(2,1,2,1)$$

此 ν 值与 λ 值显然满足关系(5.9)。

上面所说的 S_n 的类实际上就是共轭元的类（见后），它在 S_n 的表示论中有重要作用。

§6 相对性原理与洛仑兹羣

6.1 正常洛仑兹变换

按相对性原理（狭义），物理规律在任何惯性系中具有相同的形式，亦即运动方程在洛仑兹变换下不变，因此，洛仑兹变换是所有物理系统的对称变换。与前面讨论过的变换不同，它是与时间有关的，因而必须在时空四維图景中来考查，而且方程的不变性不能简单地归结为哈密顿量的不变性。这种对称

性的物理含义是惯性系在物理上的等价性，其几何意义可理解为四維时空（闵可夫斯基空间）中的旋转对称性。

四維时空中的点（事件）的坐标可写为

$$X=(x_1,x_2,x_3,x_4) \qquad (6.1)$$

其中前三个分量

$$\begin{cases} x_1=x \\ x_2=y \\ x_3=z \end{cases} \qquad (6.2)$$

为空间坐标（事件发生的地点），第四分量

$$x_4=ct \qquad (6.3)$$

为以光速 c 为系数的时间坐标（事件发生的时间）。当四个坐标分量取遍所有实数值时，点X便描给出整个四維时空。从惯性系S到 S' 的特殊洛仑兹变换为

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \\ x_4' \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & -\beta\gamma \\ 0 & 0 & -\beta\gamma & \gamma \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \qquad (6.4)$$

当 S' 相对于S的速度 v 取任意方向时，洛仑兹变换可由空间坐标轴的旋转变换和特殊变换(6.4)式生成。设将S系中空间坐标系的 z 轴转到 v 方向的转动为 $g(v_0)$，则因 S' 系的空间坐标轴与S的平行，$g(v_0)$也将坐标轴 z' 转到 v 的方向 v_0。注意此处$g(v_0)$ 的直接意义是普通的三維空间中的坐标的转动变换，这种变换可以有两种几何解释：一种是前面采用过的“主动的解释”，即这一坐标的变换表示将空间的每个点变到空间的另一点，而变换前后的坐标值表示变换前后的两点在同一个坐标系下的坐标；另一种是现在（相对论中）采用的“被动的解释”，即这一坐标的变换表示空间坐标系的变换，变换前后的坐标值表示空间同一个点在老、新两个坐标系中的坐标值，

而空间的点在变换中是不动的。这两种解释是等价的，在矩阵表示中具有统一的形式。总之，$g(\boldsymbol{v}_0)\in SO(3)$，是一个$3\times3$的幺模正交实矩阵。我们也能将$g(\boldsymbol{v}_0)$同时理解为四维时空中的坐标变换，它只作用于前三个（空间）坐标，而不改变第四（时间）坐标，因而可写

$$g(\boldsymbol{v}_0)=\begin{pmatrix}\times & \times & \times & 0\\ \times & \times & \times & 0\\ \times & \times & \times & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{6.5}$$

其中的

$$\begin{pmatrix}\times & \times & \times\\ \times & \times & \times\\ \times & \times & \times\end{pmatrix}\in SO(3) \tag{6.6}$$

现在可以将具有任意相对速度的惯性系间的洛仑兹变换写为

$$l_1(\boldsymbol{v})=g^{-1}(\boldsymbol{v}_0)l_0(v)g(\boldsymbol{v}_0) \tag{6.7}$$

其中$l_0(v)$是特殊洛仑兹变换(6.4)的矩阵

$$l_0(v)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \gamma & -\beta\gamma\\ 0 & 0 & -\beta\gamma & \gamma\end{pmatrix} \tag{6.8}$$

其中的

$$\beta=v/c \tag{6.9}$$

$$\gamma=1/\sqrt{1-\beta^2} \tag{6.10}$$

设$\boldsymbol{v}_0$相对于S的坐标系的方位角为φ_0和θ_0，则$g(\boldsymbol{v}_0)$可由坐标轴的二次转动来完成：先绕z轴转角φ_0，再绕新y轴转角θ_0。从而式(6.5)又可用速度$\boldsymbol{v}$的方位角表示

$$g(v_0)=\begin{pmatrix}\cos\theta_0 & 0 & -\sin\theta_0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ \sin\theta_0 & 0 & \cos\theta_0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}\cos\varphi_0 & \sin\varphi_0 & 0 & 0\\ -\sin\varphi_0 & \cos\varphi_0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{6.11}$$

这样，式(6.7)—(6.11)便给出了以相对速度 v 的球坐标 (v, θ_0, φ_0) 为参数的洛仑兹变换的明显表达式。仿照§4中的技巧，这个表达式也能写成简捷的指数形式。为此，引入参数 α 代替式(6.8)中的参数 v，令

$$\mathrm{sh}\alpha=-\beta\gamma=-\frac{v}{c}\Big/\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} \tag{6.12}$$

则有

$$\gamma=\mathrm{ch}\alpha$$

且式(6.8)可写为

$$l_0(\alpha)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \mathrm{ch}\alpha & \mathrm{sh}\alpha\\ 0 & 0 & \mathrm{sh}\alpha & \mathrm{ch}\alpha\end{pmatrix} \tag{6.13}$$

注意到上式有性质

$$l_0(\alpha_2)l_0(\alpha_1)=l_0(\alpha_1+\alpha_2)$$

则按§4的办法可将式(6.13)表为

$$l_0(\alpha)=e^{I_\alpha \alpha} \tag{6.14}$$

其中的

$$I_a=\frac{d}{da}l_0(a)\Big|_{a=0}=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}\tag{6.15}$$

式(6.11)可写为

$$g(v_0)=e^{-I_2\theta_0}\ e^{-I_3\varphi_0}\tag{6.16}$$

其中的 I_2 和 I_3 可由式(4.8)确定。但此处应为4×4的矩阵，即在相应的3×3矩阵中加入全为零的第4行和第4列。由式(6.14)和(6.16)，可将式(6.7)写为

$$l_1(v)=e^{I_3\varphi_0}\ e^{I_2\theta_0}\ e^{I_2a}\ e^{-I_2\theta_0}\ \ e^{-I_3\varphi_0}\tag{6.17}$$

参数的变化范围是

$$\begin{cases}-\infty<a\leqslant 0(0\leqslant v<c)\\ \ \ 0\leqslant\theta_0\leqslant\pi\\ \ \ 0\leqslant\varphi_0<2\pi\end{cases}\tag{6.18}$$

在更一般的情况下，S'系的坐标轴与S系的坐标轴可能并不彼此平行，设前者相对于后者的欧拉角为(φ,θ,ψ)*，并在S'系中引入与S系平行的坐标轴，所构成的惯性系记为$\bar{S}'$，则由$\bar{S}'$系到S'系的时空变换为

$$g(\varphi,\theta,\psi)=e^{-I_3\varphi}e^{-I_2\theta}e^{-I_3\psi}\tag{6.19}$$

由S系到$\bar{S}'$系的时空变换为(6.17)。从而由S系到S'系的时空变换可写为

$$l(\varphi,\theta,\psi,v,\theta_0,\varphi_0)=g(\varphi,\theta,\psi)l_1(v)\tag{6.20}$$

其中六个参数具有明确的物理意义：φ,θ,ψ是S'的坐标轴相对于S系的坐标轴的三个欧拉角；v,θ_0,φ_0是S'系相对于S系

* 此处这三个角的定义是，先将S系的坐标轴绕z轴转角ψ，再将新坐标轴绕新的y轴转角θ，再将所得坐标轴绕新z轴转角φ，最后所得的坐标轴便与S'系的坐标轴平行。

的速度 v 在 S 系的空间标架下的球坐标。

式(6.20)给出了任意两个惯性参考系之间的时空变换矩阵，假定空间标架都取为右旋的。它可以分解为只依赖相对速度和只依赖空间标架的相对取向的两个部分之积，前者是空间标架取向相同的二参考系间的洛仑兹变换，后者是空间标架的纯转动变换。洛仑兹变换是在保持事件的时空间隔不变的条件，亦即在条件（齐次的）

$$x_1'^2+x_2'^2+x_3'^2-x_4'^2=x_1^2+x_2^2+x_3^2-x_4^2 \tag{6.21}$$

之下引出的；由矩阵 l 的各个因子也不难看出式(6.20)是满足这个条件的。有时在广义下将满足(6.21)式的所有线性时空变换都称为（齐次）洛仑兹变换，这样的变换显然包含时间反演和空间反演：

$$x_1'=x_1, x_2'=x_2, x_3'=x_3, x_4'=-x_4 \tag{6.22}$$

$$x_1'=-x_1, x_2'=-x_2, x_3'=-x_3, x_4'=x_4 \tag{6.23}$$

但由变换(6.20)的组成因子不难看出，它是不包含上述两种变换的。为了不引起混淆，又将通常的洛仑兹变换(6.20)称为正常洛仑兹变换。

6.2 正常洛仑兹群

由惯性参考系的定义知，如惯性系 S_2 相对 S_1 作匀速运动，S_3 相对 S_2 作匀速运动，则 S_3 相对于 S_1 也作匀速运动。所以，如从 S_1 到 S_2 和从 S_2 到 S_3 的时空变换都是正常洛仑兹变换，则从 S_1 到 S_3 的时空变换也必是正常洛仑兹变换。换言之，任二正常洛仑兹变换之积也必为一个正常洛仑兹变换。可见，所有正常洛仑兹变换的集合构成一个群，称为正常洛仑兹群。利用这个概念，相对性原理（狭义）又可表述为：正常洛仑兹群是所有物理体系的对称群。这一对称性是普遍的和严格的。

(6.20)式给出了正常洛仑兹群的矩阵表示，当参数 φ，θ，

ψ 和 v 跑遍一切可能值时，4×4的矩阵 l 便描出整个群。所以，正常洛仑兹群是6维的連续群。有时我们说这个群是連通的，这是指它的参数变化区域是連通的。事实上，参数 $\varphi,\theta,\psi,v,\theta_0,\varphi_0$ 的变化区域显然是一个六維連通域；而在参数的連续变换下，区域的連通性是不变的，因而群的連通性是一种与参数的选取无关的拓扑性质。

正常洛仑兹变换的矩阵 l 除了满足条件(6.21)之外，还满足

$$\det l=1 \tag{6.24}$$

$$l_{44}\geqslant 1 \tag{6.25}$$

这可以由 l 的组成因子看出：l_0 和其它因子都满足此二条件，因而乘积也满足此条件($l_{44}=l_{044}$)。条件(6.25)的意义是保证事件的因果关系（时间顺序）的绝对性，即与参考系无关。这一点可如下看出：设有两个可能存在因果联系的事件，则其空间距离不能超过光在其时间间隔內所走过的距离，即必有

$$\sqrt{(\varDelta x_1)^2+(\varDelta x_2)^2+(\varDelta x_3)^2}/|\varDelta x_4| = \varDelta r/(c\,|\varDelta t|)\leqslant 1$$

又设这两个事件在另一惯性系中的时间间隔（带有系数 c）为 $\varDelta x_4'$，则有：

$$\varDelta x_4'=l_{41}\varDelta x_1+l_{42}\varDelta x_2+l_{43}\varDelta x_3+l_{44}\varDelta x_4 = \left[l_{44}+\left(l_{41}\frac{\varDelta x_1}{\varDelta x_4}+l_{42}\frac{\varDelta x_2}{\varDelta x_4}+l_{43}\frac{\varDelta x_3}{\varDelta x_4}\right)\right]\cdot\varDelta x_4 \tag{6.26}$$

注意到任二矢量的內积的绝对值不超过二矢量的长度之积，上式中小括号內的和式的绝对值有上限

$$\sqrt{l_{41}^2+l_{42}^2+l_{43}^2}\cdot\sqrt{(\varDelta x_1)^2+(\varDelta x_2)^2+(\varDelta x_3)^2}/|\varDelta x_4|$$

另一方面条件(6.21)要求

$$l_{41}^2+l_{42}^2+l_{43}^2-l_{44}^2=-1$$

即

$$\sqrt{l_{41}^2+l_{42}^2+l_{43}^2}=\sqrt{l_{44}^2-1}$$

从而有

$$\left|l_{41}\frac{\Delta x_1}{\Delta x_4}+l_{42}\frac{\Delta x_2}{\Delta x_4}+l_{43}\frac{\Delta x_3}{\Delta x_4}\right|\leqslant\sqrt{l_{44}^2-1}$$

于是

$$l_{44}-\sqrt{l_{44}^2-1}\leqslant\left[l_{44}+\left(l_{41}\frac{\Delta x_1}{\Delta x_4}+l_{42}\frac{\Delta x_2}{\Delta x_4}+l_{43}\frac{\Delta x_3}{\Delta x_4}\right)\right]\leqslant$$

$$l_{44}+\sqrt{l_{44}^2-1} \qquad (6.27)$$

上式表明，当$l_{44}\geqslant1$时，式(6.26)中Δx_4的系数是正的。所以，这时$\Delta x_4'$与Δx_4同号，即两个事件的先后次序是绝对的。这就排除了包括时间反演的变换。在此条件下，式(6.24)又排除了包含空间反演的变换，相当于要求在所有惯性参考系中都采用例如右旋标架。

回忆一下由相对性原理导出正常洛仑兹变换的过程，不难看出，上述条件足以确定时空坐标的齐次线性变换必为正常洛仑兹变换。换言之，满足条件(6.21)，(6.24)，(6.25)的4×4矩阵必有(6.20)式的形状。所以正常洛仑兹群也就是满足以上三个条件的矩阵的群。我们用符号L_p表示这个群。用矩阵l的方程来表达条件(6.21)，写为矩阵形式

$$(x_1'\ x_2'\ x_3'\ x_4')\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1'\\x_2'\\x_3'\\x_4'\end{pmatrix}$$

$$=(x_1\ x_2\ x_3\ x_4)\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{pmatrix}$$

或简记为

$$X'J\tilde{X}'=XJ\tilde{X} \tag{6.28}$$

$$J=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix} \tag{6.29}$$

将变换

$$\tilde{X}'=l\tilde{X} \tag{6.30}$$

代入(6.28)式并注意事件时空坐标X的任意性，便得到

$$\tilde{l}l=J \text{ 或 } l^{-1}=J\tilde{l}J \tag{6.31}$$

（试与矩阵的正交条件作比较）。这样我们可写

$$L_p=\{l: l^{-1}=J\tilde{l}J,\ \det l=1,\ l_{44}\geqslant 1\} \tag{6.32}$$

式(6.31)包含关于l的阵元的10个独立的约束方程，因而l的16个阵元中只有6个是独立的。由此也可看出L_p是6维的连续群。前面已经具体给出一组物理意义非常明确的参数。

6.3 全洛仑兹群与推广的洛仑兹群

如果在群L_p中再加入空间反演变换(6.23)，即加入矩阵

$$-J=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

则L_p将被扩充为一个更大的群L_f

$$L_f=\{l,(-J)l: l\in L_p\} \tag{6.33}$$

L_f成群这一点是不难验证的，只需验证逆元的存在和乘法的封闭性：$[(-J)l]^{-1}=-l^{-1}J=-J\tilde{l}=-Jl'\in L_f$; $l(-J)l'=-J\tilde{l}^{-1}l'=-Jl''$, $(-J)l(-J)l'=(-J)(-J)l''=l''$，等等。这个群的意义是任二惯性系之间的时空变换群，而参考系的空间

标架既可是右旋的也可是左旋的，但事件的因果关系仍然保持不变。所以也称 L_f 为全洛仑兹群。注意到 $\det(-J)=-1$，如果 A 是满足(6.21)式，且 $\det A=-1$ 和 $A_{44}\geqslant 1$ 的任一变换，则 $(-J)A$ 显然也满足(6.21)式以及 $\det[(-J)A]=1$ 和 $[(-J)A]_{44}\geqslant 1$。由此推知 $(-J)A=l$，即 $A=(-J)l$。这表明，L_f 中的 $(-J)l$ 包含了所有行列式为 (-1) 的满足式 (6.21) 和44分量大于1的矩阵。总之，L_f 是满足 (6.21) 式的、行列式为 ± 1 的、44分量大于1的矩阵的集合。但行列式为 ± 1 的条件已含于式(6.21)中，可以去掉。事实上，如任意 4×4 实矩阵 A 满足(6.21)式或等价的(6.31)式，对 $\tilde{A}JA=J$ 两边取det，则得 $(\det A)^2=1\Rightarrow \det A=\pm 1$。因而有

$$L_f=\{A: A^{-1}=J\tilde{A}J,\ A_{44}\geqslant 1\} \qquad (6.34)$$

式 (6.33) 表明群 L_f 的元（矩阵）可以分为属于 L_p 和 $(-J)L_p$ 的两部分。由于它们的行列式分别为 $+1$ 和 -1，所以每个部分的矩阵不可能连续地过渡到另一部分中去，即这两个部分是互不連通的；但每个部分显然都是連通的（可用 L_p 的参数标记）。因而群 L_f 是一个非連通的六維連续群（具有6个連续参数，1个两値分立参数），具有两个不相連通的連通分支。

用时间反演变换(6.22)，即矩阵 J 来扩充全洛仑兹群 L_f，可以得到一个以 L_f 为子群的矩阵群 L，称为推广的洛仑兹群。按这个定义，L 应写为

$$L=\{A, JA: A\in L_f\} \qquad (6.35)$$

由式(6.34)容易验证，(6.35)式成群。注意到 $(JA)_{44}=-A_{44}$，不难看出，当 A 跑遍 L_f 时，JA 将跑遍所有满足条件 (6.31) 和44分量不超过 -1 的矩阵。所以，L 是由满足(6.31) 式且44分量的绝对値不小于1的 4×4 实矩阵组成的。又，条件(6.31)的第一个式子的44分量为（其中的 l 现在的符号是 A）

$$A_{14}^2+A_{24}^2+A_{34}^2-A_{44}^2=-1$$

因此必须有

$$A_{44}^2\geqslant 1 \tag{6.36}$$

可见条件(6.36)是包含在(6.31)当中的。所以L是所有满足(6.31)的4×4实矩阵的群。可写为

$$L=\{A: A^{-1}=J\tilde{A}J\} \tag{6.37}$$

式(6.35)又可写为(利用(6.33))

$$L=\{l,-Jl,Jl,-l: l\in L_p\} \tag{6.38}$$

由此可知，L的矩阵可分成四个部份：L_p，$(-J)L_p$，JL_p，$(-I)L_p$。它们由矩阵的分立参数$\det A$和A_{44}的四组值$(1,\geqslant 1)$，$(-1,\geqslant 1)$、$(-1,\leqslant -1)$和$(1,\leqslant -1)$来划分，而连续参数即L_p的六个参数。分立的参数不能通过连续变化来过渡，所以这四个部份是互不連通的；但每个部份都是連通的。我们说群L有四个互不連通的連通分支，它是一个有四値分立参数的六维連续群。四个分支的特征矩阵分别为I（单位矩阵），$-J$（空间反演矩阵），J（时间反演矩阵），$-I$（时空全反演矩阵）。当参数（$\varphi,\theta,\psi,\theta_0,\varphi_0$）由零点出发跑遍所有可能値时，式(6.38)将由上述四个特征矩阵出发描出L的四个分支，从而描出整个群L。

以上对群L_f和L的分析表明，它们的结构归结为群L_p的结构；而后者已由(6.20)等诸式在所取参数下明显地给出。我们就此结束对洛仑兹群的描述。

§7 幺正对称与特殊幺正羣

对于基本粒子，除了使用与时空有关的参数（力学量）以外，还需引入描绘粒子内部状况的“内部参数”（量子数）。所以粒子除了具有与时空变换性质相关的对称性之外，还存在

与“内部参数”的变换性质相关的“内部对称性”。下面以核子的同位旋对称性为例来说明如何引入这类对称性的群。

质子和中子之间的核力具有电荷无关性。这一事实导致如下的看法：如果只考虑强作用，质子和中子是全同的；他们之所以能够区分只是由于他们具有不同的电磁作用。这样，将质子和中子看做是统一的核子的不同状态（质子态和中子态）是方便的。为此，核子的状态除了原有的量子数以外，还要引入一个新的“内部”量子数，以区分这两种不同的态。这个量子态只有两个不同的值，暂时用 p 和 n 来标记（分别表质子态和中子态），可将核子的波函数（場算符）写为

$$\Psi=\begin{pmatrix}\Psi_p\\ \Psi_n\end{pmatrix}=\Psi_p\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}+\Psi_n\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$

由于略去远小于强作用的电磁作用，也就略去了质子和中子的质量差（电磁质量），这时质子和中子具有相同的质量。所以当略去电磁作用时，质子态和中子态乃是核子的两个具有相同能量的本征态（设两个态的其余量子数相同）。由此推知，核子的哈密顿算子可以写为

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}\hat{h} & 0\\ 0 & \hat{h}\end{pmatrix}=\hat{h}\times\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

我们的目的是找出关于两值的新变数(p,n)的对称群。这个群中的变换必须保证Ψ的运动方程和作为場算符的反对易关系不变。Ψ关于新变数的任意线性变换可表为作用于Ψ的2×2矩阵。由$\hat{H}$的上述形状可知，每一个这样的矩阵都与$\hat{H}$可易，因而保持Ψ的运动方程不变；但为了使反对易关系

$$\{\Psi_i(\boldsymbol{r},t),\ \Psi_j^+(\boldsymbol{r}',t)\}=\delta_{ij}\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

保持不变（其中$i=p,n$；注意Ψ_i为四行一列的矩阵，δ^3应为4×4的对角矩阵），这种变换的矩阵必须是幺正的$(uu^+=I)$。可见，关于新变数的对称群是2×2幺正矩阵的群，称为幺正群

$U(2)$。这是由核力的电荷无关性出发，唯象地引出的结论。

不难证明，每一个2×2的幺正矩阵都可以写成一个2×2的单模幺正矩阵乘以指数因子$e^{i\theta}$（θ为实数），前者所成的群称为特殊幺正群$SU(2)$，后者（1×1的幺正矩阵）所成的群称为幺正群$U(1)$。即有

$$U(2)=U(1)\times SU(2)$$

因而可将核子的$U(2)$对称分解为两种更基本的对称类型：$U(1)$对称与$SU(2)$对称。$U(1)=\{e^{i\theta}\}$对称在这里反映了核子場方程在规范变换下的不变性，在物理上相当于核子数守恒。如果将这一点看做是理所当然的，则在分析中可将这个$U(1)$去掉，而只考虑核子的$SU(2)$对称。

$SU(2)=\{u: uu^{+}=I,\ \det u=1\}$是一个实三維的連续群；这是因为每个$2\times2$的矩阵有四个复数元素，相当于八个实参数，幺正条件给出四个约束方程，单模条件给出一个约束方程，因而独立的实参数有$(8-5)=3$个。适当地选择参数，能够使这些矩阵以指数函数的形式依赖参数。由$uu^{+}=I$和$\det u=1$易知，u的一般形状可写为

$$u=\begin{pmatrix}\beta & \gamma\\ -\gamma^{*} & \beta^{*}\end{pmatrix} \tag{7.1}$$

其中β和γ是满足

$$\beta\beta^{*}+\gamma\gamma^{*}=1 \tag{7.2}$$

的任二复数。令$\beta=a-ib_3$，$\gamma=-b_2-ib_1$，则可将u写为

$$u=\begin{pmatrix}a-ib_3 & -b_2-ib_1\\ b_2-ib_1 & a+ib_3\end{pmatrix}=aI-i\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{7.3}$$

其中$\boldsymbol{b}=(b_1,b_2,b_3)$，$\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)$，而

$$I=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad \sigma_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$

$$\sigma_2=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{7.4}$$

条件(7.2)要求

$$a^2+b^2=a^2+b_1^2+b_2^2+b_3^2=1 \tag{7.5}$$

令

$$\begin{cases} a=\cos\dfrac{\alpha}{2} \\ b=\sin\dfrac{\alpha}{2} \\ \boldsymbol{n}=\boldsymbol{b}/b \end{cases} \tag{7.6}$$

式(7.3)，(7.5)又可写为

$$u=\cos\frac{\alpha}{2}I-i\sin\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{7.7}$$

注意到

$$\cos\frac{\alpha}{2}=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(-1)^l}{(2l)!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2l}$$

$$\sin\frac{\alpha}{2}=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(-1)^l}{(2l+1)!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2l+1}$$

以及

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^{2l}=I,\quad (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^{2l+1}=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

$$i^{2l}=(-1)^l,\quad i^{2l+1}=(-1)^l i$$

式 (7.7) 可化为

$$u=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-i\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{n}\cdot\sigma\right)^n=e^{-i\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \tag{7.8}$$

令

$$\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)=\alpha\boldsymbol{n} \tag{7.9}$$

$$\tau=\frac{1}{2}\sigma \tag{7.10}$$

上式又可改写为

$$u=e^{-i\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\tau}}=e^{-i(\tau_1\alpha_1+\tau_2\alpha_2+\tau_3\alpha_3)} \tag{7.11}$$

这就给出了$SU(2)$的一种参数化方案，在这种参数下u具有指数函数的形式，而指数部份线性地依赖参数。由(7.7)式不难看出

$$u(\alpha+4\pi,\boldsymbol{n})=u(\alpha,\boldsymbol{n}) \tag{7.12}$$

$$u(\alpha+2\pi,\boldsymbol{n})=-u(\alpha,\boldsymbol{n}) \tag{7.13}$$

$$u(4\pi-\alpha,-\boldsymbol{n})=u(\alpha,\boldsymbol{n}) \tag{7.14}$$

可见为了使$SU(2)$的矩阵与参数α之间是一一对应的，我们可以限定α的值域为一个半径为2π的球，但球面上的所有点必须算作是同一个点（$u(2\pi,\boldsymbol{n})=-I$）。这样的值域实际上是四維空间中的一个三維简单闭曲面。在参数α下，$SU(2)$内的乘法法则（乘法函数）将由(7.11)式中的矩阵τ_i的对易式决定。利用泡利矩阵σ_i的性质和τ_i的定义(7.10)式容易求得

$$[\tau_i,\tau_j]=i\sum_k\varepsilon_{ijk}\tau_k \tag{7.15}$$

对比关于旋转群的(4.14)式并参照(4.15)式，我们看到，$SU(2)$的$\{-i\tau_l\}$与$SO(3)$的$\{I_l\}$有同样的对易式，因而在α参数下两者的乘法函数是相同的。由此可见，群$SU(2)$与$SO(3)$具有相似的结构。为更详细地研究二者之间的关系，建立一个由$SU(2)$到$SO(3)$的映射，让$SU(2)$的每个矩阵对应$SO(3)$的一个矩阵，对应规则是二者有相同的α（转动矢量）参数

$$u(\alpha,\boldsymbol{n})\rightarrow g(\alpha,\boldsymbol{n}) \tag{7.16}$$

对应(7.16)式有下列性质：

1° 由两个群的乘法函数相同可推知

$$u(\alpha_1)u(\alpha_2)=u(\boldsymbol{f}(\alpha_1,\alpha_2))\to g(\boldsymbol{f}(\alpha_1,\alpha_2))$$
$$=g(\alpha_1)g(\alpha_2)$$

即这种对应保持群的乘法关系

$$u(\alpha_1)u(\alpha_2)\to g(\alpha_1)g(\alpha_2) \tag{7.17}$$

2° 由关系

$$u(2\pi-\alpha,\ -\boldsymbol{n})=-u(\alpha,\boldsymbol{n}) \tag{7.18}$$

$$g(2\pi-\alpha,\ -\boldsymbol{n})=g(\alpha,\boldsymbol{n}) \tag{7.19}$$

可知这一对应是二对一的，即 $\pm u$ 对应同一个 g。当 α 跑遍 $SU(2)$ 的单值域时，u 跑遍 $SU(2)$，而 g 两次跑遍 $SO(3)$。事实上 $SO(3)$ 的 α 单值域是半径为 π 的"球"，当 α 跑遍这"球"时，g 跑遍 $SO(3)$；当 α 跑遍内外半径分别为 π 和 2π 的"球壳"时，g 再次跑遍 $SO(3)$（参看图7.1和(7.19)式）。

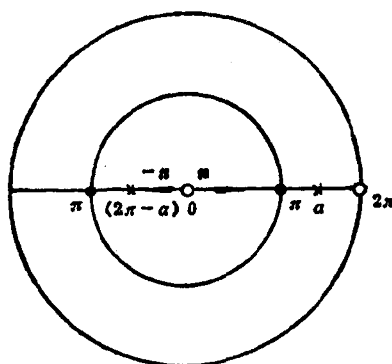


图 7.1 参数 $\boldsymbol{\alpha}=\alpha\boldsymbol{n}$ 的值域

将这两个性质合起来可以说 $SU(2)$ 两次复盖 $SO(3)$，或说 $SU(2)$ 是 $SO(3)$ 的两次复盖群。我们也可用欧拉角将 $SU(2)$ 参数化。在(7.7)式中分别取 $\boldsymbol{\alpha}$ 为 $\psi\boldsymbol{z}_0$，$\theta\boldsymbol{y}_0$，$\varphi\boldsymbol{z}_0$，可得三个 u 矩阵

$$\begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e^{-i\psi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\psi/2} \end{pmatrix}$$

因为欧拉角为（φ,θ,ψ）的转动由以上三个转动连乘产生，由 u 和 g 之间的上述关系可知，相应的 u 矩阵也由以上三个矩阵连乘产生

$$u(\varphi,\theta,\psi)=\begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} & -e^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\theta}{2} \\ e^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\theta}{2} & e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{7.20}$$

为了得到全部 u 矩阵，可限定(φ,θ,ψ)的变化范围为

$$0\leqslant\psi<2\pi,\quad 0\leqslant\theta\leqslant\pi,\quad 0\leqslant\varphi<4\pi \tag{7.21}$$

显然 $SU(2)$ 的体积元应与 $SO(3)$ 的体积元（不变测度）具有相同的形式

$$dV=\sin\theta d\varphi d\theta d\psi \tag{7.22}$$

群体积为

$$V=\int_0^{4\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\theta\int_0^{2\pi}d\psi\sin\theta=16\pi^2 \tag{7.23}$$

恰为 $SO(3)$ 的群体积的2倍。由于 $SU(2)$两次复盖 $SO(3)$，这正是意料之中的。

作用于Ψ的线性自轭算符 $\hat{\tau}$((7.10) 式给出其矩阵形式)代表一个与新变数相联系的力学量，称为核子的同位旋。它的性质与自旋角动量相似（差一常系数 $\hbar$），只是作用于不同的变

数。容易验证：$\hat{\tau}^2$ 是常数 $\frac{3}{4}=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)$，$\hat{\tau}_i$ 的本征值是 $\pm\frac{1}{2}$，质子态与中子态分别是同位旋的投影（第三分量）为 $\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$ 的本征态。这样，核子的 $SU(2)$ 对称性意味着它的同位旋为 $\frac{1}{2}$，并由式(7.7)或(7.11)可知，同位旋在强作用中守恒。所以 $SU(2)$ 的对称性有时也称为同位旋对称性。事实上 $SU(2)$ 的对称性是强作用的共性，所以其它强子也具有同位旋这一力学量，它们按角动量的合成法则相加。为了使强作用的拉氏密度函数在 $SU(2)$ 下不变，即場方程不变，各种强子場函数的同位旋分量必须按 $SU(2)$ 的某个表示（见后文）变换，这便导致强作用中总同位旋守恒。

粒子的“内部”对称性对基本粒子的合理分类和分析基本粒子的结构有着重要作用。例如同位旋（$SU(2)$）对称性的存在导致了“不同”粒子数目的减少：p，n 是核子 N 的同位旋二重态$\left(\tau=\frac{1}{2},\ \tau_3=\pm\frac{1}{2}\right)$；$\pi^+,\pi^-,\pi^0$ 是 π 介子的同位旋三重态($\tau=1,\tau_3=1,-1,0$)；$\Sigma^+,\Sigma^0,\Sigma^-$ 是 Σ 粒子同位旋的三重态($\tau=1,\tau_3=1,0,-1$)；……。再如，由两个 $\tau=\frac{1}{2}$ 的粒子可以组成 $\tau=0,1$ 的复合粒子（角动量加法规则），这就允许（当然还要与其它性质相容）π 介子由两个核子组成的（费米，杨振宁）模型，等等。能否进一步将同位旋不同而其它性质相近的粒子看作是同一种粒子的不同状态呢？这种可能性取决于是否存在比 $SU(2)$ 更高的对称性，即是否存在以 $SU(2)$ 为子群的更大对称群(对强作用而言)。沿这个方向提出的 $SU(3)$ 对称(盖尔曼等)已经取得很大的成功。特殊幺正群 $SU(3)$ 是 3×3 的

单模幺正矩阵的群，它显然在同构意义下以 $SU(2)$ 为子群。$SU(3)$对称是$SU(2)$对称的直接推广，其意义是当强子的場函数(算符)按 $SU(3)$ 的某些表示变换时，只考虑强作用的場方程近似不变。所以与 $SU(2)$对称不同，即使是对强作用$SU(3)$也是破缺的。与 $SU(2)$ 对比不难看出，$SU(3)$ 允许以三重态的粒子为基础粒子的强子模型，例如坂田模型和夸克模型。$SU(3)$对称所预言的 Ω^- 粒子1964年被发现以后，这一对称性已被公认；但粒子物理的进一步发展（J/Ψ 等粒子的发现——1974年）又为第四种夸克的存在提供了证据。与强子的四种夸克模型相应的强作用的对称性应为$SU(4)$，即4×4的单模幺正矩阵群。但$SU(4)$将预言一大批新的强子（多重态），这是有待进一步探索和发现的。

特殊幺正群$SU(n)$是$n\times n$的单模幺正矩阵的群，是(n^2-1)維的（实）連通李群。这类群是粒子的幺正（内部）对称性的基础群，最简单的是 $SU(2)(SU(1)=\{1\})$，由于它与比较直观的$SO(3)$的前述关系，对它的讨论也比较简便。我们已经给出了很具体的整体描述。当$n\geqslant3$时，情况要远较 $SU(2)$ 复杂，但从物理的应用角度来说，我们并不需要掌握群的整体结构，重要的是其局部（单位元的邻域）性质，而从李群的局部性质出发进行分析，已经有了比较简便的工具——李代数方法（见后文）。

至此，本章中我们在不使用群论的一般概念和理论的条件下对物理学中的几种主要对称性及其基础对称群进行了较为系统的讨论和描述。目的并不是要穷举对物理学有重要应用的所有群，事实上许多重要的群并未列举到，其中有些属于被称为典型群的特殊线性李群那一类型的，还将在后文中提及。

第二章　群论基础

群论是现代数学中最重要、最具有概括性的部门之一，它对数学理论的许多分支都具有重要影响。把群论的方法引入物理学则是在量子力学出现之后。人们认识到，它不但为描述物理体系的对称性提供了恰当的概念，而且也为进一步揭示各种对称性所蕴含的物理效应提供了有效的分析工具。在本章中，我们将讨论抽象群论中的一些基本概念和原理，它们对于掌握这个方法来说是必须的。

§8　群的一般概念

8.1　抽象群

上一章中所讨论的对称群都满足四条基本的运算性质。这些运算性质是针对构成对称群的对称变换的乘法而言的。但数学中的群是一个更广泛的概念，为达到这一概念，现在对于对称群进行一点抽象。

假定在对称群中我们放弃“对称变换”这一具体内容，只说它们是一些元素；同时放弃“操作乘法”的具体内容，只说在元素之间存在一种确定的二元运算（由任二元素得到一个元素）关系；最后对上述二元运算保留四条运算性质。这样就达到在其中定义一种具有四条性质的运算的一个抽象集合。所有这样的集合，不论它是由什么组成的，也不论所说的运算是怎样具体定义的，不管其中是否还定义着其它运算或具有其它性质，在数学中统称为群。为了方便，通常所说的二元运算也

称为“乘法”（抽象意义下的），并且用通常的乘法记号来表示，例如 a 和 b 相乘记为 ab 等等。这样，我们说集合 $G=\{a, b, c, \cdots\}$ 对于“乘法” ab 成群，是指：

1° 如 a、$b\in G$；则 $ab\in G$ （封闭性）

2° $(ab)c=a(bc)$，a、b、$c\in G$ （结合律）

3° G 中有“单位元素” e，使得对 G 中的所有元 a 有：$ea=ae=a$ （存在单位元）

4° G 中的每个元 a 在 G 中都有“逆” a^{-1}，使得 $a^{-1}a=aa^{-1}=e$ （存在逆运算）

一般群中的乘法不一定满足交换律 $ab=ba$，但特别的群可能具有这一性质。具有这一附加性质

5° $ab=ba$，a、$b\in G$ （交换律）

的群称为可换群或阿贝尔群。

群中所含元素的数目可以是有限的，也可以是无限的；前一情况下称群是有限的，后一情况下称群是无限的，有限群元素的个数称为群的阶。无限群中又有离散的无限群和連续的无限群，前者的元素是可数的，后者是不可数的。連续的无限群简称連续群。

例 1 多原子分子的点群和晶体点群都是有限群，置换群 S_n 是 $n!$ 阶的有限群；晶体的格群和空间群是离散的无限群；线型分子的点群 $C_{\infty v}=O(2)$ 和 $D_{\infty h}=O(2)\times\{I, i\}$，以及群 $SO(3)$，$O(3)=SO(3)\times\{I, i\}$，$L, L_p, L_f, SU(2), SU(3)$ 都是連续群。

例 2 低级点群，点群 C_n，置换群 S_2，格群，$SO(2)$ 等都是阿贝尔群。

例 3 对于矩阵乘法，下列矩阵集合都是連续群：

$GL(n)=n\times n$ 的非奇异（复）矩阵的集合（完全线性群）；

$SL(n)=\{A: A\in GL(n),\ \det A=1\}$ （特殊线性群）；

$U(n)=\{A: A\in GL(n),\ AA^{+}=1\}$（幺正群）

$SU(n)=\{A: A\in U(n),\ \det A=1\}$（特殊幺正群）；

$O(n)=\{A: A\in GL(n),\ A^{*}=A,\ A\tilde{A}=1\}$（$n$维正交群）；

$SO(n)=\{A: A\in O(n),\ \det A=1\}$（$n$维转动群）。

例 4 线性空间对矢量的加法成群，这种群是可换的連续群（它的单位元是什么矢量，任一矢量的逆是什么矢量？）。

例 5 与给定自轭算子对易的所有幺正算子（作用于同一空间）的集合对算子乘法成群。

四条基本运算性质是所有群的共性。所以由此出发所建立起来的理论将适用于任何具体的群，从而免去了不必要的重复。此外，这种抽象方法的意义还在于，它使理论结果与其逻辑前提的依赖关系明确化了。

8.2 连续群

連续群的特点在于群的元素可以連续地变动，因而依赖可以連续变化的参数。这在前一章中，特别是在对群 $SO(3)$，L_p，$SU(2)$ 的描述中已经清楚地看到了。如在前面所作的那样，我们可以将非单值的参数点合并（算作一个点），来使参数单值化，即使群元与参数值一一对应。这样，当群元跑遍整个群时，参数将跑遍某一流形[14]（可理解为 n 維曲面，n 是独立連续参数的个数，称为連续群的維数）。連续群的定义可以表为：设 a、b 为群的任二元，则 ab 的参数是 a 和 b 的参数的連续函数，a^{-1} 的参数是 a 的参数的連续函数。也就是要求群的运算是連续的。更普遍的定义应不涉及参数，可由对群性质的直接描述来给出，但这时要在群中引入連续性的概念比较难。我们较熟悉的連续性概念依赖于距离的概念（对于数就是 $|z_1-z_2|$），而后者在群中是沒有意义的，或者说我们不能要求連续群首先成为距离空间。所以在連续群的定义中必须使用更

一般的不依赖“距离”的連续性概念，而这种更抽象的連续概念是建立在拓扑空间的“邻域”概念的基础上的。因此就无法回避一些更抽象的数学概念。在这里用大量篇幅去介绍这些概念是不适当的，有兴趣的读者可参阅有关的数学专著[13]。我们只给出如下描述：一个群如果同时构成拓扑空间，而且其中的群运算在拓扑空间中是連续的，这个群就称为連续群。再回到用参数来定义連续群的初等方法。由于参数的选取不是唯一的，属于群本身的那些性质应与参数的选择无关，即在参数的双方单値而且連续的变换（拓扑变换）下不变。参数的这种在拓扑变换下不变的性质称为拓扑性质。显然，定义中乘法运算的連续性在参数的拓扑变换下是不变的。可见用引入参数的方法也可以达到与参数无关的概念。这如同在解析几何或相对论中使用坐标系或参考系进行分析可以达到与坐标系或参考系无关的结论一样。对有限群，由任二元得出其乘积元的规则可用“乘法表”来表示；对連续群，无法列出这样的表，但可用在任意参数下的“連续函数”表示，相当于有限群的乘法表。例如，设群元 a 的参数为x_a,其中 x 为（$x_1, x_2, \cdots, x_n$）的缩写，则乘法函数可写为

$$x_{ab}=f(x_a;\ x_b) \tag{8.1}$$

f 是$(f_1, f_2, \cdots, f_n)$的缩写，按定义它们是連续函数。通常将单位元的参数取为 0 ，即

$$x_e=0=(0,0,\cdots,0) \tag{8.2}$$

显然有

$$\begin{cases} f(0\,;x_b)=x_b \\ f(x_a;\,0)=x_a \end{cases} \tag{8.3}$$

以及

$$(fx_a;x_{a^{-1}})=f(x_{a^{-1}};x_a)=0 \tag{8.4}$$

所以 n 个乘法函数决定着 n 維連续群内的一切群运算，可以说

它们是"连续的乘法表"。連续群除了具有連续的参数以外，还可以同时具有分立的参数，这时乘法函数依賴分立的参数的部分仍可列成表，依賴連续参数的部分则为連续函数（见§2的2.3中的例2）。

例 1 群$SO(2)$。

$SO(2)$是2×2的正交（实）单模矩阵群，其中的每个矩阵可以写为

$$A=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha\\ \sin\alpha & \cos\alpha\end{pmatrix} \tag{8.5}$$

这正是平面绕原点转α角的转动矩阵。所以$SO(2)$也可解释为平面（二維）转动群。A的形式已经参数化了，参数α的几何意义是转角。为了使这个参数对于A是单值的，可限定

$$0\leqslant\alpha\leqslant2\pi \tag{8.6}$$

但$\alpha=0$和$\alpha=2\pi$必须算作是同一个点（因为这两个转角确定同一个转动A）。α的值域本为一线段$[0,2\pi]$，但为了使其两端幷为一个点，应将其端点連接成为一简单闭曲线（一維情形），可取为单位圆（周）。从而，$SO(2)$的元与单位圆上的点就建立了一一对应。在参数α下，$SO(2)$的乘法函数特别简单，由式(2.23)或(8.5)均可看出

$$\alpha_{ab}=f(\alpha_a;\ \alpha_b)=\alpha_a+\alpha_b \tag{8.7}$$

卽两个共轴转动相乘时，其转角相加。f的連续性反映了$SO(2)$中乘法的連续性，表明$SO(2)$是連续群（一維）。易验证在参数α下，式(8.2)、(8.3)、(8.4)均成立，这也可由α的几何意义直接看出。

例 2 群$O(2)$。

$O(2)$是2×2正交（实）矩阵群。$A\tilde{A}=I\Rightarrow\det A=\pm1$，所以$O(2)$中的矩阵只有行列式为$+1$和$-1$的两种，前一种构成子群$SO(2)$，后一种的每一个可以写为前一种的相应矩阵与行

列式为-1的矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

的乘积。上面这个矩阵表示平面上（关于x轴）的反映变换，所以$O(2)$群由平面上的转动变换与反映转动变换组成，即由平面以原点为中心的所有操作组成。为了将$O(2)$参数化，需引入区别不同转动的连续参数以及区分正常转动与反映转动的两值分立参数，前者可取转角α，后者可取$d=\pm1$（即$\det A$的值）。在参数α、d下$O(2)$的矩阵可写为

$$A(\alpha, d)=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \quad (8.8)$$

$d=+1$或-1时，α的变化域都是单位圆，所以参数(α, d)的变化域为两个分离的单位圆。现在$O(2)$内的乘法规则可写为

	$A(\alpha, 1)$	$A(\alpha, -1)$
$A(\beta, 1)$	$A(\alpha+\beta, 1)$	$A(\alpha-\beta, -1)$
$A(\beta, -1)$	$A(\alpha+\beta, -1)$	$A(\alpha-\beta, 1)$

或

$$\begin{cases} \alpha_{ab}=d_b\alpha_a+\alpha_b \\ d_{ab}=d_a d_b \end{cases} \quad (8.9)$$

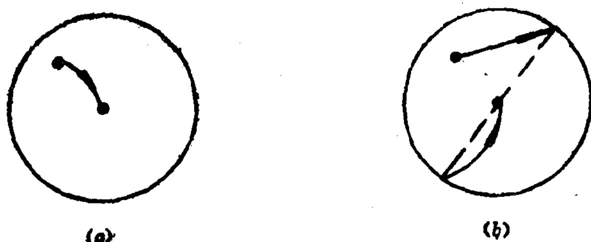
(8.9)式中的第一式确定两个关于α的连续函数。

群的连通性可由其参数流形的连通性来定义。这样连续群可分为不连通的和连通的，而后者又可分为单连通的和多连通的。按这个定义，连通性是群本身的拓扑性质，因为在参数的拓扑变换下这一性质显然不变。

例 3 $SO(2)$是连通的，因为周围是一維的连通图形；$O(2)$是不連通的，它有两个不相連通的連通分支：$SO(2)$和

$\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}SO(2)$，即两个分离的圆周$(\alpha, 1)$和$(\alpha, -1)$。

例 4 $SU(2)$是单連通的；$SO(3)$是单連通的；$O(3)$是不連通的。如上节所述，$SU(2)$的参数流形可以看做是四維实空间中的一个三維球面，这是一个单連通的图形。对$SO(3)$，用其α参数的"球"域进行分析较为方便；在图8.1中画出了



(a)　　(b)

图 8.1　$SO(3)$中的不同道路

連接任意点与原点的两条不同的典型道路，这两条道路不能通过連续变形重合，而任意連接同样两点的其它道路都可通过連续变形与其中之一重合。注意在(b)的情形中，球面上的点在連续变动中不得离开球面，否则道路将断开，而其等价点永远在直径的另一端，所以不可能变为(a)的情形。又，如果一条道路中含有多个示意等价点对的虛直径，则总可通过連续变形使这些虛直径两两重合。而重合的二虛直径是可以去掉的，所以含有偶数个虛直径的道路可化为(a)的情形，含有奇数个虛直径的道路可化为(b)的情形。这就证明了α"球"域是双連通的。群$O(3)$有两个不相連通的分支$SO(3)$和$(-I)SO(3)$，前者由全部正常转动组成，后者由全部反演转动组成，它们的$\det A$分别为$+1$和-1，因而不能互相連续过渡。$O(3)$的全部参数可写为(α, d)，分立参数$d=\pm 1$。

連续群的紧致性也可以由其参数流形的紧致性来规定。如

果参数流形是一有界闭集，则群称为是紧致的。一个点集称为是闭的，是指其所有极限点都在这个集内。紧致性的另一等价的表述是：集中每一无穷点列都包含收敛于集内一点的子列。注意到任意有界的无限点集必有极限点，就不难看出以上两种说法的等价性。可以证明，在拓扑变换下，有界闭集变为有界闭集[17]；所以紧致性也是群自身的一种拓扑性质。紧致群的一个重要性质是存在不变积分（测度）（见§4的(4.18)式）[2]。这样就可以把有限群的许多结果推广到紧致的連续群中去（請对比§4的(4.16)和(4.18)两式）；而判别一些常用群的紧致性并不困难。

例 5 $SO(2)$与$O(2)$是紧致的。

两端連接的线段$[0,2\pi]$或单位圆显然是有界的也是闭的（因而两个单位圆也如此），所以这两个群都是紧致的。$SO(2)$上有不变积分

$$\int_{so(2)}\varphi(g)dg=\int_0^{2\pi}\varphi(\alpha)d\alpha \qquad (8.10)$$

群的紧致性保证了积分区间的有界性，所以对群上的任何連续函数φ，积分(8.10)都是存在的。紧致性还保证了积分的左、右不变性，容易直接验证

$$\int_{so(2)}\varphi(g_0g)dg=\int_0^{2\pi}\varphi(\alpha+\alpha_0)d\alpha=\int_{\alpha_0}^{2\pi+\alpha_0}\varphi(\alpha')d\alpha'=\int_{so(2)}\varphi(g)dg$$

同样这积分也是右不变的（$SO(2)$是可换的）。群$O(2)$上有不变积分

$$\int_{o(2)}\varphi(g)dg=\sum_{d=\pm1}\int_0^{2\pi}\varphi(\alpha,d)d\alpha=\int_0^{2\pi}\varphi(\alpha,1)d\alpha+$$

$$\int_0^{2\pi}\varphi(\alpha,-1)d\alpha \qquad (8.11)$$

其不变性也容易验证。利用(8.9)式有

$$\int_{O(2)}\varphi(g_0g)dg=\sum_{d=\pm1}\int_0^{2\pi}\varphi(da_0+\alpha,d_0d)d\alpha$$

$$=\sum_{d=\pm1}\int_0^{2\pi}\varphi(\alpha',d_0d)d\alpha'$$

$$=\sum_{d'=\pm1}\int_0^{2\pi}\varphi(\alpha',d')d\alpha'=\int_{O(2)}\varphi(g)dg$$

同样可验证右不变性。

例 6 $SO(3)$与$SU(2)$是紧致的。

这两个群的α参数的“球”域显然都是有界的和闭的，因而群是紧致的。其上的不变测度已由式(4.22)和(7.22)具体给出。

例 7 空间平移操作群和洛仑兹群是非紧致的。

平移群的参数可取为平移的位移矢量，它充满整个空间，显然是无界的，所以不是紧致的。洛仑兹群的参数v（速度）$<c$，但不能等于c，即群中没有$v=c$的变换。因此$v=c$的点是参数域的极限点（存在着$v\to c$的参数点列）而其本身又不在参数域内。可见这个参数集合不是闭的，因而群是非紧致的。

§9 群的主要子集

9.1 子 群

如果群G的一个子集M对G中的乘法也成群，则称其为G的一个子群。群G本身和只含单位元的子集$\{e\}$显然都是G的子群，其它的子群称为真子群。按这个定义可以看出，G的子集M成为G的子群的条件（充要的）是：M包含其中每个元的逆和任二元的积。

例 1 第二类点群中的全体第一类操作成一真子群（第一类点群）。A_n是S_n的真子群($n>1$)。

例 2 有下列子群关系

$$L — L_f — L_p$$

$$GL(n) \left\langle \begin{array}{l} SL(n) — SU(n) \\ U(n) \angle\!— O(n) \end{array} \right\rangle SO(n)$$

$$\begin{array}{l} \quad\quad\quad\quad\quad / \text{第二类点群} \\ \quad\quad\quad\quad O(3) — SO(3) — \text{第一类点群} \\ E(3) \left\langle \begin{array}{l} E^{+}(3) — T(3) \searrow \\ \text{空间群} ——————— \text{格群} \end{array} \right. \end{array}$$

其中$E(3)$、$E^{+}(3)$、$T(3)$分别为三維空间的欧几里得群、刚体运动群、平移群。

用群G中的任一元左（右）乘子群M的所有元生成的子集（G的）称为M的左（右）陪集，记为

$$aM = \{am;m \in M\}$$

$$Ma = \{ma;m \in M\}$$

其中 a 为G的任一元。当a跑遍G时，我们得到许多左陪集aM。这些左陪集中的任意两个，要么完全相同（重合），要么沒有一个元素相同（不相交）。这一点可如下证明。

若陪集aM和bM含有一个共同的元素c,则有$m_1, m_2 \in M$，使

$$am_1 = bm_2 = c$$

$$\Rightarrow b = am_1 m_2^{-1} = am_3, \qquad m_3 \in M$$

$$\Rightarrow bM = am_3 M = a\{m_3 m; m \in M\}$$

$$= a\{m'; m' \in M\} = aM$$

所以这两个陪集必重合。我们保留M的所有不同的左陪集，这些左陪集包含了G的全部元而又互不相交。可见，群G可分解为任一子群M的所有左陪集（互不相交）的和集。关于右陪集也

有同样的结论。此外任一陪集中的元素的数目显然与子群M的阶相等。因此，有限群的阶等于其任意子群阶的整数（陪集的个数）倍。即有

$$N(G)/N(M)=\text{整数} \qquad (9,1)$$

这个命题称为拉格朗日定理。

将有限群G按其子群M的左陪集进行分解的手续可如下进行：第一陪集就是M本身；在G中任取一个不在M中的元a，便得到另一陪集aM；在G中再取一个不在M和aM中的元b，便得到异于M和aM的陪集bM；……。由于G有限，这一手续终将穷尽G的全部元素，从而完成G的分解。同样可将G按M的右陪集分解。

例 3 C_{3v}按子群C_3和子群$\{I, \sigma_v^{(1)}\}$的陪集分解。

参看§2的2.3和C_{3v}的乘法表，容易作出C_3的左陪集和右陪集、$\{I, \sigma_v^{(1)}\}$的左陪集和右陪集分别如下：

$$C_3=\{I, C_3, C_3^2\}, \quad \sigma_v^{(1)}C_3=\{\sigma_v^{(1)}, \sigma_v^{(2)}, \sigma_v^{(3)}\};$$

$$C_3=\{I, C_3, C_3^2\}, \quad C_3\sigma_v^{(1)}=\{\sigma_v^{(1)}, \sigma_v^{(3)}, \sigma_v^{(2)}\};$$

$$\{I, \sigma_v^{(1)}\}, \quad C_3\{I, \sigma_v^{(1)}\}=\{C_3, \sigma_v^{(3)}\},$$

$$C_3^2\{I, \sigma_v^{(1)}\}=\{C_3^2, \sigma_v^{(2)}\};$$

$$\{I, \sigma_v^{(1)}\}, \quad \{I, \sigma_v^{(1)}\}C_3=\{C_3, \sigma_v^{(2)}\},$$

$$\{I, \sigma_v^{(1)}\}C_3^2=\{C_3^2, \sigma_v^{(3)}\}。$$

其中子群C_3由同一元生成的左、右陪集是相同的，而子群$\{I, \sigma_v^{(1)}\}$由同一元生成的左、右陪集则不同。注意到$N(C_{3v})=6$，$N(C_3)=3$，$N(\{I, \sigma_v^{(1)}\})=2$，可验证拉氏定理

$$N(C_{3v})/N(C_3)=2, \quad N(C_{3v})/N(\{I, \sigma_v^{(1)}\})=3$$

例 4 由点群O验证拉氏定理。

$N(O)=24$，其子群$T, D_4, D_2, C_4, C_3, C_2$的阶分别为12，8，4，4，3，2，都是24的约数。

9.2 生成元

从群的一部分元出发，经群内运算所生成的集合（群的子集）必为群的一个子群。因为这个集合中必包括其中每个元的逆和任二元的积。特别地也可能生成整个群。例如，设 a 是有限群 G 的任一元，由 a 出发经群的运算可以得到 G 的元 a^2, a^3，…。由于群 G 是有限的，我们只能得到有限个不同的元，所以在 a 的幂次中 a 迟早要重复出现，它前面的元便是 e。于是我们只能得到不同的元：

$$a,\ a^2,\ a^3,\ \cdots,a^n=e$$

这个集合显然是 G 的一个子群。这样的群称为循环群。所以，有限群的每个元都生成群的一个循环子群。群的任意元所生成的循环子群的阶也称为这个元的阶。显然 a 的阶等于使得 $a^n=e$ 的最小整数 n。例如群 C_{3v} 的元 I 是 1 阶的，它生成的循环子群为 $\{I\}$；元 C_3、C_3^2 为 3 阶的，所生成的循环子群都是 $\{I, C_3, C_3^2\}=C_3$；元 $\sigma_v^{(1)}$、$\sigma_v^{(2)}$，$\sigma_v^{(3)}$ 都是 2 阶的，所生成的循环子群分别为 $\{I, \sigma_v^{(1)}\}$，$\{I, \sigma_v^{(2)}\}$，$\{I, \sigma_v^{(3)}\}$。

群的经群运算可以生成整个群的最小子集称为群的生成元。生成元的选取不是唯一的，可以按需要确定。

例 1 C_{3v} 的生成元。

显然 C_{3v}（不是循环群）不能由一个元生成；但由 C_{3v} 的乘法表立即可见，子群 C_3 以外的三个元可由这子群与 $\sigma_v^{(1)}$ 中的任何一个来生成，而这个子群又可由 C_3 和 C_3^2 中的任一个生成；所以 C_{3v} 的生成元可由 $\{C_3, C_3^2\}$ 中的任一元与 $\{\sigma_v^{(1)}, \sigma_v^{(2)}, \sigma_v^{(3)}\}$ 中的任一元组成。而这样选出的两个元是不能互相生成的，即最小子集。

例 2 S_n 的生成元。

在§5 中已经表明 S_n 中的每个元（n 次置换）都可以表为若干个对换的乘积，即可由对换来生成。另一方面，每个对换又可写为

$$(ij)=(1j)(1i)(1j)$$

即可由$(1i)$型的对换生成。因此，每个n次置换都可由(12)，(13)，(14)，…，$(1n)$来生成。而这$(n-1)$个对换的每一个显然都不能由其余的对换生成，所以它们构成了S_n的一组生成元。另一种可能的选择是取$\{(12),(23),\cdots,(n-1\ n)\}$为$S_n$的生成元。这组对换也是不能互相生成的。例如$(i,\ i+1)$显然既不能由它左边的对换生成，也不能由它右边的对换生成；而它两边的对换是互相独立的，不能产生新的对换。再者，S_n的每个对换(因而每个置换)(ij)都可由这组对换生成：设$i<j$，则可写$(i,j)=(i,i+l)$，$l=1$时它即是一个生成元，$l=2$时，有

$$(i,\ i+2)=(i+1,\ i+2)(i,\ i+1)(i+1,\ i+2);$$

$l=3$时有

$$(i,\ i+3)=(i+2,\ i+3)(i,\ i+2)(i+2,\ i+3)$$

也是通过$(i,\ i+2)$由$(k,\ k+1)$型对换生成；递推下去，最后就证明了$(i,\ i+l)$最终可由$(k,\ k+1)$型对换生成。

对于连续群，含单位元的那个连通分支可由与单位元充分临近的一些元的无穷乘积来生成，正如任何有限转动都可以通过无穷次无穷小的（与恒等转动充分临近的）转动来产生一样；而其它分支则可由含单位元的分支与一定的分立元素的乘积产生。因而整个群可由一些具有无穷小参数值的元（与单位元临近）和几个分立元生成。下面以群$O(3)$为例来说明这一点，一般讨论将在后面进行。$O(3)$的含单位元的分支是

$$SO(3)=\{g(\boldsymbol{n},\ \alpha)\}$$

而$g(\boldsymbol{n},\ \alpha)$可写为

$$g(\boldsymbol{n},\ \alpha)=\left[g\left(\boldsymbol{n},\frac{\alpha}{N}\right)\right]^N,\qquad N\sim\infty \tag{9.2}$$

可见，$SO(3)$可由

$$g(\boldsymbol{n}, \varepsilon)=g\left(\boldsymbol{n}, \frac{a}{N}\right), \qquad \varepsilon\sim 0 \qquad (9.3)$$

来生成。利用§4的(4.9)式和$\varepsilon\sim0$的情况，有

$$g(\boldsymbol{n}, \varepsilon)=I+\varepsilon_1 I_1+\varepsilon_2 I_2+\varepsilon_3 I_3 \qquad (9.4)$$

其中$(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3)=\varepsilon\boldsymbol{n}$。由此可见，这些生成元去掉单位矩阵$I$这一常项后（即$\Sigma\varepsilon_i I_i$）张成一个以$I_1$、$I_2$、$I_3$为基的线性空间。这样$g(\boldsymbol{n}, \varepsilon)$又由$\{I_1, I_2, I_3\}$来“生成”。在这意义下，又将这三个矩阵称为$SO(3)$的无穷小生成元。如§4中所述，它们的对易式决定着$SO(3)$的结构（乘法函数）。$O(3)$的另一个分支$(-I)SO(3)$由所有反演转动组成，其中的特征元是分立元$(-I)$即反演矩阵（操作）。这样，$O(3)$的生成元便是$\{I_1, I_2, I_3; (-I)\}$。注意这里的“无穷小生成元”一词已离开了生成元的原意，按原意应为(9.4)式，而$I_i(\det I_i=0)$实际上并不是$SO(3)$的元（转动矩阵）。这一点与有限的（分立的）生成元的含意有别。

9.3 类

群G中的两个元a和b如果具有关系

$$a=xbx^{-1}, \qquad x\in G \qquad (9.5)$$

则称为是相互共轭的。这个关系的相互性是明显的，因为由(9.5)可写$b=x^{-1}ax=(x^{-1})a(x^{-1})^{-1}$，而$x\in G$要求$(x^{-1})\in G$。共轭关系的另两个简单性质是：每个元与自己共轭(因$e\in G$)；如果a与b共轭、b与c共轭，则a与c也共轭$(x, y\in G\Rightarrow xy\in G)$。共轭关系的这三个性质（对称性、自反性、传递性）表明这是一种封闭性的关系，它将群G划分为一些互不相交的子集——共轭元素的类。群中相互共轭的元素的集合称为群的一个类。群中的任意元必然属于群的某一个类，而任意两个类不可能含有共同的元（否则由于传递性，这两个类中的元将全部互相共

轭，因而是同一个类）。所以群是它的所有类（互不相交）的和集。需留意，G的子群M中的两个元在G中共轭（属于G的同一个类），并不意味着他们在M中共轭（属于M的同一个类）；这是因为G中存在式(9.5)中那样的元x并不表明M中也存在这样的元。

例 1 任意群的单位元构成一类。

例 2 阿贝尔群的每个元自成一类。

例 3 置换群的类。

为了找到S_n的分类方法，我们来研究与置换s共轭的置换$xsx^{-1}(x\in S_n)$的形式。设置换s将数码i变为i'，置换x将i变为x_i，即

$$s:(i\to i')$$
$$x:(i\to x_i)=(i'\to x_{i'})$$

则置换xsx^{-1}将数码x_i变为$x_{i'}$，即有

$$xsx^{-1}:(i'\to x_{i'})(i\to i')(x_i\to i)=(x_i\to x_{i'})$$

假定s已写为轮换乘积的形式，上面的结论表明，为了由s写出xsx^{-1}，只需将s中的每个数码i换为数码x_i即可。可见xsx^{-1}与s有相同的循环结构。反之，两个有相同的循环结构的置换，总存在将其中之一的各个数码变为另一个的相应数码的一个置换x，从而二者通过x共轭。所以两个置换共轭的充要条件是它们具有相同的循环结构。这样，S_n的共轭元的类就是有相同循环结构的置换的类(ν)（见§5）。

例 4 点群的类。

由于有下列关于点操作的共轭条件，容易将任一点群的操作分类。

(1) 恒等操作只能与自己共轭（因而自成一类）；

(2) 反演操作也只能与自己共轭（因而也自成一类）；

(3) 由(2.26)式可知，反映只能与反映共轭，二反映共轭

的充要条件是群中存在使二映面重合的操作；

(4) 由(2.27)式可知，旋转只能与旋转共轭，二旋转共轭的充要条件是二转角相等且群中存在能使二转轴重合的第一类操作或能使二转轴反向重合的第二类操作；

(5) 由(2.25)，(2.26)，(2.27)式可知，(4)中关于旋转的表述对于旋转反演或旋转反映也是成立的。

例如，C_{3v} 的第一个类为$\{I\}$；它的三个映面能够通过群中操作 C_3 相互重合，所以$\{\sigma_v^{(1)}, \sigma_v^{(2)}, \sigma_v^{(3)}\}$构成第二个类；$C_3$ 和 $C_3^2=C_3^{-1}$ 是转角相同而转轴方向相反的两个旋转，群中第二类操作 $\sigma_v^{(i)}$不改变此二轴的方向，因而符合在 $\sigma_v^{(i)}$下反向重合的条件，故$\{C_3, C_3^2\}$为第三个类。再如，点群 $O=\{I, 6C_2, 8C_3, 6C_4, 3C_4^2\}$（参看§5的5.5）的五个类已在此书写方式中表明，其中C_4^2与C_2的转角都是 π，但因 O 中没有能使 4 次轴与 2 次轴重合的转动，它们并不属于同一类。最后，$SO(3)$的类完全按转角划分，即转角相等的转动组成一类；这是因为 $SO(3)$中包含了能使任二转轴重合的转动。类似地，不难将其它所有点群的操作分类。

关于类的阶（元的个数）有一个定理，它类似于关于子群的阶的拉氏定理：有限群的阶是其类的阶的倍数。为证明此定理，考虑 G 中与元 g 可易的所有元的集合 $M_g=\{x; xgx^{-1}=g, x\in G\}$。$M_g$ 显然是 G 的一个子群。现将 G 按 M_g 的左陪集分解：

$$M_g, \; aM_g, \; bM_g, \; \cdots\cdots$$

这些陪集有如下的性质：每个陪集中的元按方式 xgx^{-1} 产生同一个共轭于 g 的元；不同陪集产生不同的元。这是因为，若 $x_0\in M_g$，则有 $(ax_0)g(ax_0)^{-1}=ax_0gx_0^{-1}a^{-1}=aga^{-1}$ 与 x_0 无关；另一方面，如果 $aga^{-1}=bgb^{-1}$，则有 $(b^{-1}a)g(b^{-1}a)^{-1}=g$，从而 $b^{-1}a\in M_g\Rightarrow(b^{-1}a)M_g=M_g\Rightarrow aM_g=bM_g$，这同 aM_g 与 bM_g 是

不同陪集的假定相抵触，故必须有$aga^{-1}\neq bgb^{-1}$ 所以，G中与g共轭的不同的元数亦即包含元g的那个类K_g的阶，等于M_g的不同陪集数。从而得

$$N(G)=N(K_g)\cdot N(M_g) \qquad (9.6)$$

例如取$G=C_{3v}$，$g=C_3$，则$M_g=$子群$C_3=\{I, C_3, C_3^2\}$，C_{3v}按C_3左陪集的分解为$C_3, \sigma_v^{(1)}C_3$，而$K_g=\{C_3, C_3^2\}$，所以式(9.6)成为$6=2\times3$。O的五个类的阶分别为1，6，8，6，3，它们都是$N(O)=24$的约数。

9.4 不变子群

群G的子群N如果由G的完整的类组成，即N含有它的每个元在G中的全部共轭元，则称为不变子群或正规子群。子群N成为不变的条件也可写为

$$xNx^{-1}=N \quad , \quad x\in G \qquad (9.7)^{*}$$

或等价地写为

$$xN=Nx \quad , \quad x\in G \qquad (9.8)$$

因而不变子群也可定义为其左陪集与右陪集相同的子群。

例 1 C_{3v}的子群C_3是不变的，而子群$\{I, \sigma_v^{(1)}\}$则不是（见C_{3v}按此二子群的陪集分解和C_{3v}的共轭元类的例子）。

例 2 第二类点群中第一类操作的集合所成的子群是不变子群。

例 3 S_n的子群A_n是不变子群。

例 4 空间群的纯平移子群（格群）是不变子群。

事实上，由(3.2)和(3.3)式，有

$$(\alpha|\boldsymbol{t})(\varepsilon|\boldsymbol{n})(\alpha|\boldsymbol{t})^{-1}=(\varepsilon|\alpha\boldsymbol{n})=(\varepsilon|\boldsymbol{n}') \qquad (9.9)$$

说明空间群中与基本平移共轭的元也必须是基本平移，后者的平移矢量为前者的平移矢量在空间群的点群操作下的像。本例

---

* 按定义，对任意$n\in N$，有$xnx^{-1}\in N$，从而知$xNx^{-1}\subset N$；又由$x^{-1}N(x^{-1})^{-1}\subset N$ ($x^{-1}\in G$) 推知$N\subset xNx^{-1}$，故有(9.7)式。

的一个等价表述为：晶体的布喇菲格子在该晶体的点群下不变。

例 5 阿贝尔群的所有子群都是不变子群。

G的不变子群N的所有陪集的集合$\{N, aN, bN, \cdots\}$对陪集的乘法$N_1N_2=\{n_1n_2: n_1\in N_1, n_2\in N_2\}$成群。这个群的元是$N$的陪集，它称为$G$对于$N$的商群，记为$G/N$。显然有*

$$N(G/N)=N(G)/N(N) \tag{9.10}$$

集合$\{N, aN, bN, \cdots\}$对上述乘法成群可验证如下：

1° 乘法的封闭性：$aNbN=abNN=abN=cN$，$c=ab\in G$；

2° 结合律：$aNbNcN=abcN=a(bc)N$
$=aN(bNcN)$；

3° N是单位元：$NaN=aNN=aN$；

4° $(aN)^{-1}=a^{-1}N$，$a^{-1}\in G$，$a^{-1}NaN=aNa^{-1}N=eN=N$。

我们看到，以上演算的关键步骤在于N的左、右陪集相同$(aN=Na)$这一点。所以N的陪集成群是由N是不变子群这一条件决定的。

例 6 $G_{3v}/C_3=\{C_3, \sigma_v^{(1)}C_3\}$；$S_n/A_n=\{A_n, (12)A_n\}$；$O(3)/C_i=\{gC_i: g\in SO(3)\}$。

例 7 空间群G对于平移子群N的商群。

$$G/N=\{(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))N: \alpha\in G_0\} \tag{9.11}$$

其中G_0是G的点群。

9.5 群的直积

由较小的群能够组合成较大的群；较大的群有时也能分

* 注意，此处N在两种涵义下应用，括号内的N代表群，括号外的N代表群的阶。

解成较小的群，使得较大的群的结构简单地由较小的群的结构确定。从而可能将一个较复杂群的讨论简化为若干较简单的群的讨论。这种组合与分解可以通过直积（直接乘积）来实现。如G_1和G_2是群G的两个互易的子群，且G的每个元都能唯一地写为G_1的一个元与G_2的一个元的积，则称G为这两个子群的直积

$$G=G_1\times G_2=G_2\times G_1$$

其中两个子群互易是指它们的元互易。第二个条件也可分为两项：G的任意元可分解为G_1的一个元与G_2的一个元的乘积；除单位元外，G_1和G_2再没有其它公共元。事实上，分解的唯一性与无非单位公共元的说法是等价的。设g_1，$h_1\in G_1$，g_2，$h_2\in G_2$，则分解的唯一性意味着

$$g_1g_2=h_1h_2\ \ (\text{即}h_1^{-1}g_1=h_2g_2^{-1})\Rightarrow\begin{cases}g_1=h_1\\g_2=h_2\end{cases}\left(\text{即}\begin{cases}h_1^{-1}g_1=e\\h_2g_2^{-1}=e\end{cases}\right)$$

而无非单位公共元意味着

$$g_1=g_2\Rightarrow\begin{cases}g_1=e\\g_2=e\end{cases}$$

可见两者是互通的。

当由任二群G_1和G_2定义直积群$G=\{g_1g_2;\ g_1\in G_1,\ g_2\in G_2\}$时，$G$内乘法的规定必须满足：

1° 在G_1和G_2内的乘法分别与原有的定义相同；

2° G_1的元与G_2的元之间的乘法是可易的；

3° 除单位元外，G_1的元和G_2的元做为G的元是不相同的。

直积群的结构是完全由其因子群的结构决定的。例如，如果已知G_1和G_2的乘法表，则由

$$(g_1g_2)(h_1h_2)=(g_1h_1)(g_2h_2)=f_1f_2$$

就定出了G的乘法表。显然有（对有限群）

$$N(G_1\times G_2)=N(G_1)\times N(G_2) \qquad (9.12)$$

再如，容易证明：G的任二元共轭的充要条件是它们在G_1和G_2内的分量是分别共轭的。因而，G的每个类，其元在G_1和G_2内的分量将分别构成G_1和G_2的类；反之，G_1的任一类与G_2的任一类的积都形成G的一个类。所以，G_1的类与G_2的类的一切可能的乘积便给出G的全部类。因而有（对有限群）

$$(G_1\times G_2)\text{的类数}=G_1\text{的类数}\times G_2\text{的类数} \qquad (9.13)$$

例 1 所有包含反演操作的第二类点群都可表示为它的第一类操作的子群G_1与子群$C_i=\{I,\ i\}$的直积。

由第二类点群的构造原则（见§2）可知，含反演i的第二类点群可写为

$$G=G_1\cup iG_1=IG_1\cup iG_1$$

即G的每个元都可写为G_1的元与C_i的元之积；又C_i的两个元都与G_1的元可易；而$G_1\cap C_i=\{I\}$。所以有

$$G=G_1\times C_i$$

特别地有

$$O_h=O\times C_i$$
$$D_{\infty h}=O(2)\times C_i$$
$$O(3)=SO(3)\times C_i$$

例 2 $U(n)=U(1)\times SU(n)$。

例 3 $O(3)\times S_n=\{gs;\ g\in O(3),\ s\in S_n\}$是原子中的电子体系的对称群。注意$O(3)$和$S_n$分别描述了系统的空间对称性和置换对称性。

在以上例子中，不难由已知的因子群的类作出直积群的类。这留给读者作为练习。

§10 群的同构与同态

10.1 同 构

具有相同结构（乘法表）的两个群，做为抽象群来看待时，是完全等同的，它们称为彼此同构的群。更确切地说，若G_1和G_2的元之间存在一一对应，且G_1中任二元的积在G_2中的对应元是此二元在G_2中对应元的积，则称G_1与G_2同构，记作

$$G_1 \cong G_2$$

例 1 $S_3 \cong C_{3v}$（见 §5 的5.1中最后的陈述），$A_4 \cong T$，$S_4 \cong T_d$（使正四面体的对称操作与其顶点的置换对应）。

例 2 所有n阶的群当n为质数时同构。

按拉氏定理，有限群的每个元的阶（即它所生成的循环子群的阶）必为群的阶n的约数；故当n为质数时，只允许有1阶元（单位元）和n阶元。但由任一n阶元生成的n阶循环子群必为整个群（真子群的阶必小于群的阶）；所以阶为质数的群必为循环群。同阶的循环群显然是同构的。例如，当$n=2$时，有$S_2 \cong C_i \cong C_s \cong C_2$。

10.2 同 态

更一般些，若群G_1和G_2的元之间存在的对应是单方单值的，即对G_1的每个元，G_2中都有唯一一个元与之对应，而G_2中的每个元都对应着G_1的元，并且G_1中任二元的积在G_2中的对应元等于此二元在G_2中对应元的积，则称G_2同态于G_1。可见，同构是同态的特例，两者的差别是，同构关系要求是双方单值的，而同态关系只要求单方单值性；共同点在于两种对应都保持群的乘法。

G_1和G_2的元之间的上述对应，定义了由G_1到G_2上的映射，这种映射称为同态映射。利用这个概念，G_2同态于G_1也

可以定义为：存在由G_1到G_2上的同态映射。如果用φ表示由G_1到G_2上的一个映射$\varphi(g_1)=g_2$（φ的"定义域"为整个G_1，"值域"为整个G_2），则φ成为同态映射的（充要）条件为

$$\varphi(gh)=\varphi(g)\varphi(h), \quad g,h\in G_1 \qquad (10.1)$$

同态映射如果还是一一对应的，则称为同构映射。两个群的同构也可定义为：二者之间存在同构映射。

所有被映射为G_2的单位元的G_1的元的集，即

$$N=\{g_1;\ g_1\in G_1,\ \varphi(g_1)=e_2\}$$

称为同态映射φ的核。可以证明，核N是G_1的不变子群：

1° $g_1,h_1\in N\Rightarrow\varphi(g_1)=\varphi(h_1)=e_2\Rightarrow\varphi(g_1h_1)$
$=\varphi(g_1)\varphi(h_1)=e_2\Rightarrow g_1h_1\in N$；

2° $g_1\in N\Rightarrow\varphi(g_1)=e_2\Rightarrow\varphi(g_1^{-1})=\varphi(g_1^{-1})\varphi(g_1)$
$=\varphi(g_1^{-1}g_1)=\varphi(e_1)=e_2\Rightarrow g_1^{-1}\in N$；

3° $g_1\in N,\ x\in G_1\Rightarrow\varphi(xg_1x^{-1})=\varphi(x)\varphi(g_1)\varphi(x^{-1})$
$=\varphi(x)e_2\varphi(x^{-1})=\varphi(x)\varphi(x^{-1})=\varphi(e_1)=e_2$
$\Rightarrow xg_1x^{-1}\in N$。

现在要进一步弄清，在同态关系中，与G_2的每个元对应的是G_1的哪些元。亦即要明确G_2的元在同态映射下的原像由G_1的哪些元构成。为此，我们考查一下G_1中二元g_1和h_1被φ同态地映射为G_2的同一元的（充要）条件

$$\begin{aligned}&\varphi(g_1)=\varphi(h_1)\Longleftrightarrow\\&\varphi(g_1)\varphi(h_1^{-1})=\varphi(h_1)\varphi(h_1^{-1})=\varphi(h_1h_1^{-1})\\&\qquad\qquad=\varphi(e_1)=e_2\Longleftrightarrow\\&\varphi(g_1h_1^{-1})=e_2\Longleftrightarrow g_1h_1^{-1}\in N\Longleftrightarrow\\&g_1\in Nh_1=h_1N\end{aligned}$$

可见这个条件是g_1和h_1属于N的同一陪集。所以，在同态映射下，G_1中核N的每个陪集被映为G_2中同一个元；反之，G_2的每个元的原像都是G_1中N的一个陪集。这样，由G_1到G_2上的

每个同态映射确定了G_1中同态核的陪集与G_2的元之间的一个一一对应。当G_1为有限群时，有

$$N(G_2)=N\text{在}G_1\text{中的陪集数}=N(G_2)/N(N)$$

这时同态对应是$N(N)$对一的。上面的讨论还表明：同态映射成为同构映射的充要条件是其核只含单位元。

例 1 设φ为由S_n到二元群$\{e, a\}$上的一个映射：φ（偶置换）$=e$，φ（奇置换）$=a$。φ显然是一同态映射(注意$a^2=e$)，核为A_n，同态对应是$n!/2$对一的，且有下列一一对应关系：

$$A_n——e$$

$$(12)A_n——a$$

例 2 取φ为由$O(3)$到$SO(3)$上的映射

$$\varphi(g(\boldsymbol{n},\ a))=g(\boldsymbol{n},\ a)$$

$$\varphi(ig(\boldsymbol{n},\ a))=g(\boldsymbol{n},\ a)$$

这是二对一的同态映射，核为$C_i=\{I, i\}$，有一一对应

$$g(\boldsymbol{n},\ a)C_i——g(\boldsymbol{n},\ a)$$

例 3 $SO(3)$同态于$SU(2)$。§7的（7.16）式给出由$SU(2)$到$SO(3)$的二对一的同态映射，核为$SU(2)$的不变子群$\left\{\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}-1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\right\}\doteq N$，有一一对应

$$u(\alpha)N=\{u(\alpha),\ -u(\alpha)\}——g(\alpha)$$

其中$u\in SU(2)$，$g\in SO(3)$，但α的值域为$SO(3)$的单值"球域"（$\alpha\leqslant\pi$）。如果我们只考虑$SU(2)$单位元的邻域，即在式(7.16)中只考虑充分小的α值，则同态对应(7.16)将是一一的。通常将这种情况表为：$SU(2)$与$SO(3)$是局部同构的。

例 4 由空间群G到其点群G_0上的映射φ

$$\varphi((\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha)+\boldsymbol{n}))=\alpha$$

是同态的。这可由§3的(3.2)式立即看出。其核

$$N=\{(\varepsilon|\boldsymbol{n})\}$$

是空间群的平移子群（格群），它的陪集与G_0的元是一一对应的

$$(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha))\{(\varepsilon|\boldsymbol{n})\}——\alpha$$

10.3 同态定理

上面的讨论表明，如G_2同态于G_1，则G_2的元与同态核N在G_1中的陪集示即商群G_1/N的元是一一对应的。注意到这一对应关系

$$gN——\varphi(g),\ g\in G_1,\ \varphi(g)\in G_2$$

有性质

$$\left\{\begin{matrix}aN——\varphi(a)\\ bN——\varphi(b)\end{matrix}\right.\Rightarrow aNbN=abN——\varphi(ab)=\varphi(a)\varphi(b)$$

又知这是一同构对应，所以有

$$G_2\cong G_1/N \tag{10.2}$$

即：群G的同态像同构于G对于同态核的商群，这就是同态定理。

例 1 $\{e,\ a\}\cong S_n/A_n$，$\{e,\ a\}$是二阶群。

例 2 $SO(3)\cong O(3)/C_i$。

例 3 $SO(3)\cong SU(2)/\left\{\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right\}$

例 4 $\{\alpha\}\cong\{(\alpha|\boldsymbol{V}(\alpha)+\boldsymbol{n})\}/\{(\varepsilon|\boldsymbol{n})\}$，空间群的点群同构于空间群对于平移子群的商群。

一个群可以有不只一个同态像，但由同态定理可知，如果群是有限的，则它的同态像的阶与相应的同态核的阶的积是一常数，等于群的阶。亦即对给定的群，其同态的像与核二者的阶成反比关系。

第三章　群的表示理论

为了表达物理内容，必须考虑物理体系的对称群在系统的状态（态矢）空间及其子空间中的表现——这些空间中的变换群；后者是前者的同态像。物理理论（如通常的量子力学）的线性结构，要求这些变换是线性的，因而这种同态像是一些线性算子群或矩阵群。一个群的各种可能的（线性）同态像及其所作用的空间的许多重要性质都是由群本身来决定的。进行这种分析的理论工具便是群的表示理论。所以在物理学特别在量子力学中，群的表示理论比群论本身更为重要。

本章将讨论这个理论的一般性概念和基本内容，关于有限群和李群的表示，将分别于后两章中讨论。

§11　羣的线性表示

11.1　表示的一般定义

如果对于群G的每个元g，都有作用于线性空间$\mathscr{V}$上的一个线性算子$\hat{A}(g)$与之对应，且满足

$$\hat{A}(gh)=\hat{A}(g)\hat{A}(h) \tag{11.1}$$

则称这组算子$\{\hat{A}(g),\ g\in G\}$为群的一个表示，$\mathscr{V}$称为表示空间；$\mathscr{V}$的維数称为表示的維数。这组算子显然具有以下性质：

1°　对算子乘法是封闭的；

2°　算子乘法满足结合律；

3°　$\hat{A}(e)$是单位算子

$$\hat{A}(e)\hat{A}(g)=\hat{A}(eg)=\hat{A}(g),\ \hat{A}(g)\hat{A}(e)=\hat{A}(g)$$

习惯上用 $\hat{I}$ 代表 $\hat{A}(e)$；

4° $\hat{A}(g^{-1})$是$\hat{A}(g)$的逆算子

$$\hat{A}(g)\hat{A}(g^{-1})=\hat{A}(e)=\hat{I}, \quad \hat{A}(g)\hat{A}(g^{-1})=\hat{I}$$

可见这组算子成群，且同态于G。所以G的每个表示就是它的一个由作用于某一空间上的线性算子组成的同态像。

当群元与表示的算子是一一对应时，即群与表示的算子群同构时，表示称为是忠实的。

每个群都有一个平凡的表示

$$\hat{A}(g)=1 \quad , \ g\in G$$

即所有元都映射为一維空间的单位算子，称为单位表示。

当表示空间$\mathscr{V}$是（复）内积空间（酉空间），而算子$\hat{A}(g)$都是$\mathscr{V}$上的酉算子

$$\hat{A}^{+}(g)\hat{A}(g)=\hat{I} \quad , \ g\in G \tag{11.2}$$

则称表示为酉表示。

在不会引起混淆时，用符号$\hat{g}$表示群G的某一表示中与元g对应的算子，即

$$\hat{g}=\hat{A}(g) \quad , \ g\in G \tag{11.3}$$

是方便的，今后我们将同时采用这种简化记号。

当表示空间$\mathscr{V}$的維数有限时，以上关于算子表示的概念也可以等价地用矩阵的形式来代替。因为在有限維空间上的算子，在取定的基下与矩阵是一一对应的，且二算子之积的矩阵为二算子的矩阵之积；所以与算子群$\{\hat{A}(g); \ g\in G\}$同构的矩阵群$\{A(g); \ g\in G\}$也是群G的同态像，可称为G的矩阵表示。反之，如果已知G的一个$n\times n$的矩阵表示；则在任一n維线性空间$\mathscr{V}$中取定一组基后，可以定义$\mathscr{V}$上的算子$\hat{A}(g)$，使其在所取基下的矩阵为$A(g)$，从而又得到一个算子表示。可见，算子表示和矩阵表示是群的线性表示的两种等价表述形式。每种形式都具有各自的优点。

在矩阵表示的定义中，不涉及表示空间。我们说$\{A(g);\ g\in G\}$是G的一个n維表示，只要$n\times n$的矩阵$A(g)$满足

$$A(g)A(h)=A(gh) \qquad (11.4)$$

即$n\times n$的矩阵群$\{A(g);\ g\in G\}$是G的一个同态像。如果表示的矩阵都是酉的

$$A^{+}(g)A(g)=I \quad ,\ g\in G \qquad (11.5)$$

则称表示是酉的。类似地可以给出单位表示、忠实表示等概念的矩阵表述。

例 1 点群C_{3v}的自然表示。

C_{3v}的每个操作都是普通三維空间中的线性算子，所以它本身就是一个线性算子群，因而可看作是自身的一个表示，通常称为自然表示。它显然是忠实的。

在空间中任取一组基，容易得到这表示的一个矩阵形式。例如可取一直角坐标系，使z轴沿C_3的转轴，x轴沿$\sigma_v^{(3)}$的映面，便可写出生成元C_3和$\sigma_v^{(3)}$的矩阵形式

$$C_3=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\qquad \sigma_v^{(3)}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

其它群元的矩阵可利用简单的几何关系（参看2.1节）直接写出，也可利用它们与生成元的关系求得

$$C_3^2=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\sigma_v^{(1)}=C_3^2\sigma_v^{(3)}=\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$I=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_v^{(2)}=C_3\,\sigma_v^{(3)}=\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

这些点操作都是等距操作，做为算子都是幺正的（不改变矢量的长度）；因为所取基矢是正交归一的，它们的矩阵自然也是幺正的。所以这个表示是酉表示。

例 2 S_3的一个三維表示。

设 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$ 是普通(实)三維空间中任意三个无关矢量，让S_3的每个元按以下的关系对应于此空间上的一个线性算子

$$\begin{cases} \hat{A}(s)\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{a}_{s(1)} \\ \hat{A}(s)\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{a}_{s(2)} \\ \hat{A}(s)\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{a}_{s(3)} \end{cases}, \qquad s\in S_3$$

其中 $s(i)$表数码 i 在置换 s 下所换成的数。由

$$\begin{aligned} \hat{A}(ss')\boldsymbol{a}_i&=\boldsymbol{a}_{ss'(i)}=\boldsymbol{a}_{s(s'(i))} \\ &=\hat{A}(s)\boldsymbol{a}_{s'(i)}=\hat{A}(s)\hat{A}(s')\boldsymbol{a}_i, \quad i=1,2,3 \end{aligned}$$

知

$$\hat{A}(ss')=\hat{A}(s)\hat{A}(s')$$

可见，$\{\hat{A}(s)\colon s\in S_3\}$构成 S_3在普通三維空间中的一个三維算

子表示。假定$\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3\}$并不是等长且等夹角的矢量组，则

$$\boldsymbol{a}_{s(i)} \cdot \boldsymbol{a}_{s(i')} = \boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{a}_{i'}$$

不能一般地成立。这时表示$\hat{A}(s)$不是幺正的。这个算子表示在基$\{\boldsymbol{a}_i\}$下的矩阵形式为

$$A((123)) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, A((12)) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

类似地可写出其它置换（非生成元）的矩阵。注意这两个矩阵是幺正的，显然其它矩阵也是幺正的，从而$A(s)$是一个酉表示。这个例子说明，一个非酉的算子表示，在适当基矢下的矩阵却可以成为一个酉表示。

例 3 $SO(3)$是$SU(2)$的一个非忠实表示（通过（7.16）式）。

例 4 (1.7)式和(1.9)式分别定义了平移群和旋转群在粒子波函数空间（无旁維）中的酉表示。

例 5 物理体系的能量本征子空间，即属于同一能级的定态的集合是其对称群的表示空间。

设体系的对称群为$G=\{g\}$，则g在态矢空间中的算子$\hat{g}$与体系的哈密顿算子$\hat{H}$可易。从而有（Ψ_E表示属于能量E的定态）

$$\hat{H}(\hat{g}\Psi_E) = \hat{g}\hat{H}\Psi_E = E(\hat{g}\Psi_E)$$

即$\hat{g}$将$\hat{H}$的每个本征态变为属于同一本征值的本征态，或本征子空间$\mathscr{V}_E = \{\Psi_E: \hat{H}\Psi_E = E\Psi_E\}$在$\hat{g}$下不变。这样，与$G$同态的群$\{\hat{g}\}$也可以看作是作用在子空间$\mathscr{V}_E$上的导出算子群，它显然是$G$的一个表示，其維数等于能级$E$的简并度。

11.2 表示的等价性

设$\hat{A}(g)$和$\hat{A}'(g)$分别为群G作用于空间$\mathscr{V}$和$\mathscr{V}'$上的两个表示，如果存在由$\mathscr{V}$到$\mathscr{V}'$的双方单值的线性映射，即$\mathscr{V}$与$\mathscr{V}'$间

的同构映射 $\hat{f}$，使

$$\hat{A}'(g)=\hat{f}\hat{A}(g)\hat{f}^{-1} \quad , \; g\in G \tag{11.6}$$

则称 $\hat{A}'(g)$ 与 $\hat{A}(g)$ 等价，记作

$$\hat{A}'(g)\sim\hat{A}(g) \tag{11.7}$$

这里，$\hat{A}(g)$ 和 $\hat{A}'(g)$ 分别作用于 $\mathscr{V}$ 中的矢量 v 和 $\mathscr{V}'$ 中的矢量 $v'=\hat{f}v$。(11.6)的含意是：如果 $\hat{A}(g)$ 将 v_1 变为 v_2，则 $\hat{A}'(g)$ 将 $v_1'=\hat{f}v_1$ 变为 $v_2'=\hat{f}v_2$；所以 $\hat{A}(g)$ 在 $\mathscr{V}$ 中的作用与 $\hat{A}'(g)$ 在 $\mathscr{V}'$ 中的作用是相似的，或者当忽略 $\mathscr{V}'$ 与 $\mathscr{V}$、$v'=\hat{f}v$ 与 v 的具体差别时，$\hat{A}'(g)$ 与 $\hat{A}(g)$ 是相同的。当 $\mathscr{V}$ 和 $\mathscr{V}'$ 是有限維空间时，这意味着 $\hat{A}(g)$ 在 $\mathscr{V}$ 的基 $\{e_1, \cdots, e_n\}$ 下的矩阵与 $\hat{A}'(g)$ 在 $\mathscr{V}'$ 的基 $\{\hat{f}e_1, \cdots, \hat{f}e_n\}$ 下的矩阵相同。所以对有限維表示，等价性的定义也可表为：在适当的基下二等价表示有相同的矩阵

$$A'(g)=A(g) \quad , \; g\in G \tag{11.8}$$

如果在 $\mathscr{V}$ 和 $\mathscr{V}'$ 中任意取基，(11.8)式当然不能成立；但同一算子在不同基下的矩阵只差一相似变换，所以这时(11.8)式应代以

$$A'(g)=SA(g)S^{-1} \quad , \; g\in G \tag{11.9}$$

在矩阵表述中，式(11.9)被取作两个矩阵表示的等价定义。这样，等价性概念在两种表述中是一致的。

由上述定义不难看出，表示之间等价的关系滿足自反性、对称性（相互性）、传递性，因而一个群的所有表示可以划分为等价表示的类。由于等价的表示可以看做是本质上相同的，许多关于表示的概念，如可约性等，通常并不是针对某一个表示，而是针对一个等价表示类的。在作具体讨论时，我们可以在每个类中取出一个表示做为这个类的代表。在上面的例 2 中我们看到，所作的算子表示并不是酉表示，但其矩阵形式却可以是在适当基下的酉表示。这表明原来的算子表示具有等价的酉表示(读者试将这个酉表示作出来)。后面将证明，对有限群和具有不变积分的連续群（可简称为有不变和的群）来说，这

一情形是普遍的成立的，即其任一表示都有等价的酉表示。所以对于有不变和的群，在其表示的每个等价类中都可以取酉表示做为代表。也就是在研究这种群的表示时，我们可以只考虑酉表示。这使得关于有不变和的群的表示理论得以简化。

11.3 等价酉表示的存在定理

等价酉表示的存在定理：具有不变和的群的任意表示都等价于某个酉表示。

设G为有限群，$\hat{A}(g)$为G的一个表示，表示空间为$\mathscr{V}$，$\mathscr{V}$是一个内积空间，内积以$\langle u|v\rangle$表示。如果表示$\hat{A}(g)$不是酉表示，即有

$$\langle \hat{A}(g)u|\hat{A}(g)v\rangle \neq \langle u|v\rangle$$

我们可以修改$\mathscr{V}$中内积的定义，使在新内积下$\hat{A}(g)$是酉的。新内积定义为

$$(u,\ v)=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}\langle \hat{A}(g)u|\hat{A}(g)v\rangle \qquad (11.10)$$

则有

$$(\hat{A}(h)u,\ \hat{A}(h)v)=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}\langle \hat{A}(g)\hat{A}(h)u|\hat{A}(g)\hat{A}(h)v\rangle$$

$$=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}\langle \hat{A}(gh)u|\hat{A}(gh)v\rangle$$

$$=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}\langle \hat{A}(g)u|\hat{A}(g)v\rangle$$

$$=(u,\ v), \qquad h\in G$$

可见$\hat{A}(g)$不改变矢量的新内积。所以$\hat{A}(g)$对新内积是酉表示。如在$\mathscr{V}$内取两组基$\{e_i\}$和$\{e_i'\}$，使前者对旧的内积是正交归一的，后者对新内积是正交归一的，设由前者到后者的变换矩阵为S。如前所述，$\hat{A}(g)$在$\{e_i\}$下的矩阵$A(g)$将不是幺正

的，但$\hat{A}(g)$在$\{e_i'\}$下的矩阵$A'(g)$将是幺正的，并有

$$A(g)=SA'(g)S^{-1} \quad , \quad g\in G$$

可见，任意矩阵表示都有等价酉表示。这就是定理的矩阵表述。

对G为具有不变积分的連续群的情况，定理的证明完全相同，只须将对群元的有限求和代之以对群体积的不变积分：

$$\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G} f(g) \longrightarrow \frac{1}{V(G)}\int_G f(g)dg$$

并注意有与$\sum\limits_{g\in G} f(gh)=\sum\limits_{g\in G} f(g)$相似的

$$\int_G f(gh)dg=\int_G f(g)dg$$

总之，定理对有限群和紧致的連续群成立。

§12 表示的可约性

12.1 可约表示与不可约表示

设$\hat{A}(g)$是群G在空间$\mathscr{V}$上的表示，按定义，$\mathscr{V}$中的任一矢量v在所有算子$\hat{A}(g)$ $(g\in G)$的作用下均变为$\mathscr{V}$中的矢量，亦即空间$\mathscr{V}$在$\hat{A}(g)$下是不变的。对于$\mathscr{V}$的零子空间$\{0\}$，这一点显然也是成立的。但对于$\mathscr{V}$的眞子空间，这一点就不一定成立。如果$\mathscr{V}$的眞子空间$\mathscr{W}$在$\hat{A}(g)$下不变，即对任意$w\in\mathscr{W}$有

$$\hat{A}(g)w\in\mathscr{W} \quad , \quad g\in G$$

则由空间$\mathscr{V}$上的表示自然导出一个在子空间$\mathscr{W}$上的表示，称为表示$\hat{A}(g)$在$\mathscr{W}$上的缩小。如果$\mathscr{V}$不存在在$\hat{A}(g)$下不变的眞子空间，则$\hat{A}(g)$的表示空间将不能再缩小。这样，按表示空间能否缩小，可将表示分为两种情况：可约的与不可约的。由此引出可约表示与不可约表示的确切定义如下：

群G在空间$\mathscr{V}$上的表示$\hat{A}(g)$称为可约的或不可约的，当

$\mathscr{V}$中存在或不存在对于 $\hat{A}(g)$不变的真子空间。

例如上节中例 2 给出的S_3的三維表示 $\hat{A}(s)$显然是可约的，因为在那个表示空间中存在一个一維的不变真子空间，它由矢量$(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3)$生成。事实上有

$$\begin{aligned}\hat{A}(s)(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3)&=\boldsymbol{a}_{s(1)}+\boldsymbol{a}_{s(2)}+\boldsymbol{a}_{s(3)}\\&=\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3,\qquad s\in S_3\end{aligned}$$

如果 $\hat{A}(g)$是可约的，设其不变真子空间为$\mathscr{W}$，在$\mathscr{W}$中任取一组基，v_1，v_2，…，v_m，为了得到$\mathscr{V}$的基，需在$\mathscr{W}$外再补充$(n-m)$ 个 (n 是$\mathscr{V}$的維数)与前m个矢量无关且彼此无关的矢量v_{m+1}，v_{m+2}，…，v_n。这样，在$\mathscr{V}$的基$\{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$下 $\hat{A}(g)$的矩阵有形

$$A(g)=\overset{\quad\leftarrow m\rightarrow\quad\leftarrow n-m\rightarrow}{\left(\begin{array}{c:c}A_{11}(g) & A_{12}(g)\\ \cdots\cdots & \cdots\cdots\\ 0 & A_{22}(g)\end{array}\right)}\begin{array}{l}\updownarrow m\\ \updownarrow n-m\end{array},\quad g\in G\qquad(12.1)$$

其中 $A_{11}(g)$便是 $\hat{A}(g)$在不变子空间$\mathscr{W}$上导出的矩阵表示。

反之，若G的一个$n\times n$的矩阵表示$A(g)$经相似变换可化为式(12.1)的型式，则以$A(g)$为矩阵的n維算子表示$\hat{A}(g)$必有一个m維不变子空间，因为经基矢变换可将$\hat{A}(g)$的矩阵化为(12.1)型。故$\hat{A}(g)$为可约表示。

总之，一个算子表示为可约的充要条件是它在任意基下的矩阵表示可经相似变换化为(12.1)型。从而又得到可约性定义的矩阵表述：

具有(12.1)型的等价表示的矩阵表示称为可约的；否则称为不可约的。

注意到等价的算子表示在适当的基下具有相同的矩阵形

式，可知：与可约(或不可约)的算子表示等价的表示也是可约（或不可约）的。可见，不论是矩阵表示还是算子表示，可约性的概念都不只是属于一个表示的，而是属于等价表示类的。所以，当我们说一个表示是可约（或不可约）的时，就是指与它等价的所有表示，即它所属的等价表示类都是可约（或不可约）的。

按上述定义，一个可约的表示空间$\mathscr{V}$总可写为不变子空间$\mathscr{V}_1$与另一与$\mathscr{V}_1$无关的子空间$\mathscr{V}_2$的直和

$$\mathscr{V}=\mathscr{V}_1\oplus\mathscr{V}_2 \tag{12.2}$$

在前面的陈述中，$\mathscr{V}_1$即$\mathscr{V}$由$\{v_1, v_2, \cdots, v_m\}$张成的$\mathscr{V}$，而$\mathscr{V}_2$由$\{v_{m+1}, \cdots, v_n\}$张成。如果$\mathscr{V}_2$也是对$\hat{A}(g)$不变的子空间，则称表示$\hat{A}(g)$是直可约的。将$\mathscr{V}(g)$在$\mathscr{V}_1$和$\mathscr{V}_2$中的导出（缩小）表示分别记为$\hat{A}_1(g)$和$\hat{A}_2(g)$，则可写出

$$\hat{A}(g)=\hat{A}_1(g)\oplus\hat{A}_2(g) \tag{12.3}$$

并称表示$\hat{A}$为$\hat{A}_1$和$\hat{A}_2$的直和。由此，当$\hat{A}(g)$为直可约时，式(12.1)中的$A_{12}(g)$将为零矩阵，因为$\mathscr{V}_2$在$\hat{A}(g)$下也不变。从而有

$$A(g)=\left(\begin{array}{c:c} A_{11}(g) & 0 \\ \hdashline 0 & A_{22}(g) \end{array}\right), \quad g\in G \tag{12.4}$$

或

$$A(g)=A_{11}(g)\oplus A_{22}(g), \qquad g\in G \tag{12.5}$$

其中$A_{11}(g)$和$A_{22}(g)$分别为$\hat{A}_1(g)$和$\hat{A}_2(g)$的矩阵形式。因而在矩阵表述中，直可约表示的定义是具有(12.4)或(12.5)型的等价表示的表示。

一个表示如能分解为不可约表示的直和，则称为是完全可约的。如$\mathscr{V}$上的表示$\hat{A}(g)$是完全可约的，则有

$$\left.\begin{aligned}\mathscr{V}&=\mathscr{V}_1\oplus\mathscr{V}_2\oplus\cdots\oplus\mathscr{V}_h\\ \hat{A}(g)&=\hat{A}_1(g)\oplus\hat{A}_2(g)\oplus\cdots\oplus\hat{A}_h(g)\end{aligned}\right\}\tag{12.6}$$

其矩阵表述为（在$\mathscr{V}_i$中取基）

$$A(g)=A_1(g)\oplus A_2(g)\oplus\cdots\oplus A_h(g)\tag{12.7}$$

其中$\hat{A}_i(g)$，$A_i(g)$均为不可约表示。将一个表示分解成“较小的”表示的直和，称为将表示约化。完全可约的表示是指那些能够彻底约化的表示。式(12.6)或(12.7)表明了这类表示的构造方式。可见，关于完全可约表示的问题将归结为不可约表示的问题。如果已知群G的全部不可约表示，也就知道了G的所有完全可约表示，因为后者简单地由前者的直和构成。

例 1 C_{3v}的自然表示是完全可约的。

将C_3的轴取为z轴，则z轴是这个表示的一維不变子空间R_z，xy平面是这个表示的二維不变子空间R_{xy}，而表示空间R_3是这两个子空间的直和。自然表示$\hat{A}_3(g)$在R_z上的缩小是单位表示 1，在R_{xy}上的缩小记为$\hat{A}_{xy}(g)$，有

$$R_3=R_{xy}\oplus R_z$$

$$\hat{A}_3(g)=\hat{A}_{xy}(g)\oplus 1$$

其矩阵形式已在上节的例 1 中给出，可写为

$$A_3(g)=\begin{pmatrix}\times & \times & 0\\ \times & \times & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\left(\begin{array}{c:c}A_{xy}(g) & 0\\ \cdots\cdots & \cdots\\ 0 & 1\end{array}\right)$$

$$=A_{xy}(g)\oplus 1,\quad g\in C_{3v}$$

表明这个表示是直可约的。又六个$\hat{A}_{xy}(g)$或$A_{xy}(g)$不可易，因而不能同时对角化，故是不可约的。这就说明，自然表示是完全可约的。

例 2 上节例 2 中给定的S_3的表示是完全可约的。

注意到由无关的矢量组（基）$\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3\}$到矢量组$\{\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_3, \boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3\}$的变换矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \doteq S$$

是满秩的($\det S=3$)，可知第二组矢量也是无关的。从而，如将前二矢量张成的二维空间和第三矢量张成的一维空间分别记为R_2和R_1，则表示空间R_3可写为这两个子空间的直和

$$R_3 = R_2 \oplus R_1$$

又R_1和R_2都是给定表示$\hat{A}(s)$的不变子空间，导出表示分别为单位表示1和$\hat{A}_2(s)$。所以又有

$$\hat{A}(s) = \hat{A}_2(s) \oplus 1$$

注意$\hat{A}_2((123))$与$\hat{A}_2((12))$显然不可易，因而二维表示$\hat{A}_2(s)$不再可约。可见$\hat{A}(s)$是完全可约的。在矩阵表述中，S_3的两个生成元在第一组基下的矩阵为

$$A((123)) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A((12)) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

通过由基矢变换矩阵S所规定的相似变换变为在第二组基下的矩阵

$$S^{-1}A((123))S = \left(\begin{array}{cc|c} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right),$$

$$S^{-1}A((12))S = \left(\begin{array}{cc|c} -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

由这两个矩阵通过乘法得到（生成）的其它矩阵显然具有同样的对角块形，即有

$$S^{-1}A(s)S=\begin{pmatrix}\times & \times & 0\\ \times & \times & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A_2(s) & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=A_2(s)\oplus 1$$

因而矩阵表示 $A(s)$是完全可约的。

12.2 完全可约性定理

现在我们来证明：有限群和紧致的连续群的可约表示都是完全可约的。

这类群具有不变和，其任意表示都有等价酉表示。因此，只需证明每个可约酉表示是完全可约的。

设 $\hat{A}(g)$为群G在空间$\mathscr{V}$上的可约酉表示，则有不变真子空间$\mathscr{V}'\subset\mathscr{V}$。若$\mathscr{V}_\perp'$为$\mathscr{V}'$的正交补空间，即由与$\mathscr{V}'$中的所有矢量都垂直的$\mathscr{V}$中的矢量构成的子空间，则有

$$\mathscr{V}=\mathscr{V}'\oplus\mathscr{V}_\perp'$$

另一方面，算子 $\hat{A}(g)$的幺正性保证了$\mathscr{V}_\perp'$对于$\hat{A}(g)$也是不变的：若$v\in\mathscr{V}_\perp'$，则$\hat{A}(g)v\in\mathscr{V}_\perp'$。这只要证明：$v\perp\mathscr{V}'\Rightarrow \hat{A}(g)v\perp\mathscr{V}'$。设$u$为$\mathscr{V}'$中的任一矢量，则有内积等式

$$(u, \hat{A}(g)v)=(\hat{A}^+(g)u, v)=(\hat{A}(g^{-1})u, v)=0$$

最后一步已注意到V'是不变子空间，所以有 $\hat{A}(g^{-1})u\in\mathscr{V}'$，而 $v\perp\mathscr{V}'\Rightarrow v\perp\hat{A}(g^{-1})u$。如以 $\hat{A}_1(g)$和$\hat{A}_2(g)$表示$\hat{A}(g)$在不变子空间$\mathscr{V}'$和$\mathscr{V}_\perp'$上的缩小便有

$$\hat{A}(g)=\hat{A}_1(g)\oplus\hat{A}_2(g)$$

若$\hat{A}_1$和$\hat{A}_2$不再可约，则定理已被证明；若$\hat{A}_1$和$\hat{A}_2$中还有可约的，注意到酉表示的缩小仍为酉表示，上述约化手续则可继续进行，直到所得表示都是不可约的为止。假定$\mathscr{V}$是有限維的，这个手续就总可完成，从而定理得证。

上述定理保证了物理学中大部分常用群的表示的完全可约性，但有些重要的群尚未包括进来。在第一章中研究过的洛仑兹群就是一个重要例子，它不是紧致的。有一个更有用的定理

是关于半单纯群的，半单纯群是指沒有阿贝尔不变眞子群的群（沒有任何不变眞子群的群称为单纯的）。这个定理说：半单纯群的任何可约表示都是完全可约的[13]、[14]。由于紧致的連续群都是半单纯的，而半单纯的群却不一定是紧致的，这个定理就将又一批重要的群（如洛伦兹群）划入满足完全可约性定理的群之列。这对物理学来说已经足够了。

12.3 表示的约化

如上所述，我们可以限于考虑完全可约的表示；而它总可以表成不可约表示的直和。因此，关于任意群的表示的问题，以下两个问题是基本的：第一，这个群有哪些不等价的不可约的表示，即给出标准矩阵的阵元。所谓“标准矩阵”，是指在所有彼此等价的表示中指定的一个表示矩阵。第二，如何将它的任一可约表示约化，即给出变换矩阵。对这两个问题的解答将构成每种群的表示理论的基本內容，这将在后面讨论。

现在我们来说明将一个表示约化的意义。设有一组线性无关的函数（矢量）φ_1，φ_2，…，φ_n 在群G的线性算子 $\hat{g}$ 的作用下按G的一个 n 維表示$A(g)$变换

$$(\hat{g}\varphi_1,\hat{g}\varphi_2,\cdots,\hat{g}\varphi_n)=(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)A(g) \qquad (12.8)$$

即φ_i按 $A(g)$的第 i 列变换：$\hat{g}\varphi_i$等于$\{\varphi_i\}$的线性组合，组合的系数为$A(g)$的第 i 列的元。如果表示A是可约的(完全可约)，则有满方阵S，使：

$$S^{-1}A(g)S=\begin{pmatrix} A_1(g) & & & \\ & A_2(g) & & 0 \\ & 0 & \ddots & \\ & & & A_k(g) \end{pmatrix} \qquad (12.9)$$

其中$A_r(g)$是G的不可约表示的标准矩阵。现在以方阵S的列的元为系数对$\{\varphi_i\}$进行线性组合，得到一组新的线性无关的函数$\{\psi_1,\ \psi_2,\ \cdots,\ \psi_n)$

$$(\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n)=(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n)S \qquad (12.10)$$

则函数组$\{\psi_i\}$在g的作用下将按$S^{-1}A(g)S$变换

$$\begin{aligned}&(g\psi_1, g\psi_2, \cdots, g\psi_n)\\&=(g\varphi_1, g\varphi_2, \cdots, g\varphi_n)S\\&=(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n)A(g)S\\&=(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n)SS^{-1}A(g)S\\&=(\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n)S^{-1}A(g)S\end{aligned}$$

或写为

$$\begin{aligned}&(g\psi_1, g\psi_2, \cdots, g\psi_n)\\&=(\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n)\begin{pmatrix}A_1(g) & & 0\\ & A_2(g) & \\ 0 & \ddots & A_h(g)\end{pmatrix} \qquad (12.11)\end{aligned}$$

这表明n个函数ψ被分为h个组，在g的作用下，每一组都按G的一个不可约的标准矩阵变换；各组不会混合，而且，每一组函数不可能再组合成在g下单独变换的更小的组。所以将已知表示$A(g)$进行约化，也就是将按$A(g)$变换的函数组进行重新组合，使新的函数可以分为单独按G的不可约表示变换的小组；而这种组合的系数便是将$A(g)$对角块化的S矩阵的列。用几何的语言来说，这也就是将表示的空间约化：求出由原始基$\{\varphi_i\}$到不可约基$\{\psi_i\}$的变换(S矩阵)，$\{\psi_i\}$的每个小组张成一个不可约子空间，从而将空间分解为不可约子空间的直和一事被具体地实现。

将已知表示进行约化的方法并不是唯一的，例如在每个不可约子空间中进行基矢变换，所得仍是不可约基，这两组不可约基都能将空间约化，但两种约化结果中的不可约表示是彼此等价的。可以证明，用任何不同方式将给定的表示进行约化，所得的不可约表示都是对应等价的。如果将等价的表示看作是

同一的，则任意表示的约化结果是唯一的。这个命题可称为约化的唯一性定理，证明将在下一章中给出。我们总可以让出现在约化结果中的等价不可约表示取相同的矩阵——标准矩阵。如$A^{(i)}(g)$表示第i个不可约表示的标准矩阵，则可写

$$S^{-1}(g)S=\underbrace{A^{(1)}(g)\oplus A^{(1)}(g)\oplus\cdots}_{a_1\text{项}}\oplus\underbrace{A^{(2)}(g)\oplus A^{(2)}(g)\oplus\cdots}_{a_2\text{项}}$$

$$=\sum_i\oplus a_iA^{(i)}(g) \tag{12.12}$$

或简记为

$$A=\sum_i a_iA^{(i)} \tag{12.13}$$

此处$\sum$应理解为取直和，a_i为不可约成分$A^{(i)}$在表示A中的重复次数。约化的唯一性定理保证了分解式（12.13）具有确定的意义。

§13 对偶表示与乘积表示

13.1 对偶表示

由群的已知表示可以构造这个群的新表示，这可以称为群表示的运算。例如，若$A(g)$是G的一个表示，则它的复共轭$A^*(g)$也是G的表示，而$\tilde{A}(g)=\widetilde{A(g^{-1})}$是另一个表示。但$\widetilde{A(g)}$不是表示，除非$G$是阿贝尔群。其中～是矩阵的转置记号。表示$\tilde{A}(g)$称为表示$A(g)$的对偶表示。$\tilde{A}(g)$是$G$的表示这一点可验证如下：

$$\tilde{A}(gh)=\widetilde{A((gh)^{-1})}=\widetilde{A(h^{-1}g^{-1})}=\widetilde{A(h^{-1})A(g^{-1})}$$

$$=\widetilde{A(g^{-1})}\widetilde{A(h^{-1})}=\tilde{A}(g)\tilde{A}(h)\quad,\ g、h\in G$$

如果$\tilde{A}(g)$与$A(g)$等价，就说$A(g)$是自偶的。显然有下列性质：

(1) $\widetilde{\widetilde{A}}=A$；

(2) A可约$\Longleftrightarrow\widetilde{A}$可约；

(3) 酉表示的对偶表示是它的复共轭表示；

(4) 实的酉表示是自偶的。

例如C_{3v}的自然表示是自偶的（见§11中的例）

13.2 乘积表示

若$A(g)$和$B(g)$是G的两个表示，则$A(g)\oplus B(g)$和$A(g)\otimes B(g)$也是G的表示。即通过矩阵的直和或直积运算可由群的几个表示生成新的表示，其中直积表示在应用中具有重要作用。如果$A=(A_{ij})$，$B=(B_{lm})$，则按定义

$$C=A\otimes B \tag{13.1}$$

的元为

$$C_{il,jm}=A_{ij}B_{lm} \tag{13.2}$$

其中il为行标，jm为列标。C的行（列）数为A和B的行(列)数之积。易证，直积具有性质

$$(A_1\otimes B_1)(A_2\otimes B_2)=(A_1A_2)\otimes(B_1B_2) \tag{13.3}$$

$$t_r(A\otimes B)=t_rA\cdot t_rB \tag{13.4}$$

$$A\otimes(B\otimes C)=(A\otimes B)\otimes C \tag{13.5}$$

$$A\otimes(B+C)=A\otimes B+A\otimes C \tag{13.6}$$

$$(A\otimes B)^+=A^+\otimes B^+ \tag{13.7}$$

式(13.3)还蕴含

$$(A\otimes B)^{-1}=A^{-1}\otimes B^{-1} \tag{13.8}$$

最后两式表明，酉矩阵的直积也是酉矩阵。

由(13.3)式容易验证，G的两个表示的直积确实构成G的一个表示

$$A(gh)\otimes B(gh)=(A(g)\otimes B(g))(A(h)\otimes B(h)) \tag{13.9}$$

这便是原来两个表示的直积表示或乘积表示。显然，酉表示的乘积表示也是酉表示。

如果无关矢量组$\{u_1, u_2, \cdots, u_m\}$和$\{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$在$G$的操作$\hat{g}$下分别按表示$A(g)$和$B(g)$变换，则由$m\times n$个无关矢量$u_iv_j$（并矢）构成的矢量组$\{u_iv_j; i=1,2,\cdots,m; j=1,2,\cdots,n\}$将按乘积表示$A\otimes B$变换

$$\begin{aligned}\hat{g}u_iv_j&=\hat{g}u_i\hat{g}v_j=\sum_{i'}u_{i'}A_{i'i}(g)\sum_{j'}v_{j'}B_{j'j}(g)\\&=\sum_{i'j'}u_{i'}v_{j'}A_{i'i}(g)B_{j'j}(g),\quad g\in G\end{aligned}\tag{13.10}$$

通常称由$\{u_iv_j\}$张成的空间($\mathscr{W}$)为由$\{u_i\}$和$\{v_j\}$张成的两个空间($\mathscr{U}$和$\mathscr{V}$)的直积：

$$\mathscr{W}=\mathscr{U}\otimes\mathscr{V}\tag{13.11}$$

其維数为$m\times n$。这样，G的两个表示空间的直积构成G的这两个表示的直积的表示空间。

在量子力学中，单粒子的态矢可写为

$$|\psi\rangle=\sum_{s_z}\int d\tau\psi(\boldsymbol{r}, s_z)\ |\boldsymbol{r}\rangle|s_z\rangle$$

设由矢量集$\{|\boldsymbol{r}\rangle\}$和$\{|s_z\rangle\}$张成的空间分别为$\mathscr{V}_r$和$\mathscr{V}_s$，则上式表明$|\psi\rangle$为直积空间$\mathscr{V}_r\otimes\mathscr{V}_s$中的矢量。或者说：单粒子波函数的空间是空间波函数空间和自旋波函数空间的直积；完全类似地，多粒子波函数的空间可表为单粒子波函数空间的直积。因此，如果已知各单粒子波函数空间按对称群G的某些表示变换，便可断定多粒子体系的波函数空间将按这些表示的直积变换。在量子力学中，由简单体系的状态构造复合体系的状态时，乘积表示的概念具有特别重要的作用。

群G的两个不可约表示的乘积一般是可约的。这个表示的约化问题在应用中经常要碰到。所以对物理学中的常用群，不

但要作出它们的不可约表示的完全表，而且要求出其不可约表示直积的约化S矩阵元——由直积基矢到不可约基矢的组合系数。这将在后面讨论。

13.3 不可约表示的乘积中含有单位表示的条件

在应用中会碰到由两组具有已知变换性质的量的乘积进行线性组合构造不变量的问题。这类问题的群论提法如下：设矢量组$\{u_1, u_2, \cdots, u_m\}$和$\{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$分别按群$G$的不可约表示$A(g)$和$B(g)$变换，问在什么条件下才能由矢量组$\{u_i v_j\}$的线性组合构成以及怎样构成在$G$下不变的矢量？这里提到的条件也就是乘积表示$A(g)\otimes B(g)$中含有单位表示的条件。

设$\{u_i\}$和$\{v_i\}$张成的空间分别为$\mathscr{U}$和$\mathscr{V}$，$\mathscr{U}\otimes\mathscr{V}$中有非零矢量$w$在$G$下不变，则有：

$$w=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}C_{ij}u_i v_j=\sum_{i=1}^{m}u_i v_i',\quad v_i'=\sum_{j=1}^{n}C_{ij}v_j$$

$$\begin{aligned}\hat{g}w&=\sum_{i=1}^{m}\hat{g}u_i\,\hat{g}v_i'=\sum_{i=1}^{m}\Big[\sum_{l=1}^{m}u_l A_{li}(g)\Big]\hat{g}v_i'\\&=\sum_{l=1}^{m}u_l\Big[\sum_{i=1}^{m}A_{li}(g)\hat{g}\,v_i'\Big]=w=\sum_{l=1}^{m}u_l v_l'\end{aligned}$$

上式表明

$$\sum_{i=1}^{m}A_{li}(g)\hat{g}v_i'=v_l'$$

两边作$\sum\limits_{l=1}^{m}A_{kl}(g^{-1})\times$，并注意$A_{ki}(e)=\delta_{ki}$，从中解出

$$\hat{g}v_k'=\sum_{l=1}^{m}A_{kl}(g^{-1})\,v_l'=\sum_{l=1}^{m}\tilde{A}_{lk}(g)v_l'$$

可见$\{v_1', v_2', \cdots, v_m'\}$张成空间$\mathscr{V}$的不变子空间。由$\mathscr{V}$的不可约性可知，这个不变子空间必为$\mathscr{V}$本身。所以有$m\geqslant n$,否则这$m$个矢量不可能张成$n$维空间$\mathscr{V}$；同样可证$n\geqslant m$；于是得到必须

$m=n$

这又表明$\{v_1', v_2', \cdots, v_m'\}$是线性无关的且为空间$\mathscr{V}$的另一组基。这样我们就证明了，$\mathscr{U}\otimes\mathscr{V}$中存在不变矢量的必要条件是$\mathscr{U}$和$\mathscr{V}$按$G$的互偶的表示变换。显然这个条件也是充分的。此命题亦可等价地表述为：不可约表示的直积$A(g)\otimes B(g)$中含有单位表示的充要条件为$B(g)$等价于$\tilde{A}(g)$，即

$$B(g)=S\tilde{A}(g)S^{-1}, \quad g\in G \tag{13.12}$$

而且只能包含单位表示一次，唯一的（可差一常因子）不变矢量，即单位表示的基矢为

$$w=\sum_{i=1}^{m} u\ \tilde{u}_i \tag{13.13}$$

其中$\{u_i\}$和$\{\tilde{u}_i\}$分别为按表示$A(g)$和$\tilde{A}(g)$变换的基，可称为对偶基；$\tilde{u}_i$与$B(g)$的基矢的关系为

$$\tilde{u}_i=v_i'=\sum_{j=1}^{m} C_{ij}v_j \tag{13.14}$$

而(13.12)中的S为

$$S=\tilde{C}, \quad C=(C_{ij}) \tag{13.15}$$

§14 与群的表示可对易的算子

14.1 Schur引理

一个算子(或矩阵)与群的某个表示的所有算子(矩阵)可易的性质是对算子本身的一个限制条件。例如物理体系的哈密顿算子便与体系的对称群在态矢空间——哈密顿算子的作用空间中的表示可易。我们现在来研究这种限制能把算子（矩阵）确定到什么程度。为了回答这个一般问题，先来考虑所涉及的表示是不可约的这一特殊情况，其答案可由Schur引理给出。这个引理是关于算子（矩阵）代数的一个简单命题，它使群的表示理论得以简化。为了便于直接引用，下面将在群表示论的形

式下表述这个引理。实际上它的正确性与所涉及的算子组是否构成群的表示无关，而只与其可约性有关，这可从证明过程看出。

引理 1 与群的不可约表示可易的线性算子（矩阵）等于常数（或单位矩阵乘以常数）。

设 $\hat{A}(g)$为G在空间$\mathscr{V}$上的不可约表示，$\hat{P}$为$\mathscr{V}$上的线性算子，满足

$$\hat{A}(g)\hat{P}=\hat{P}\hat{A}(g) \quad , \quad g\in G \tag{14.1}$$

我们来证明，式(14.1)将$\hat{P}$限制为常数

$$\hat{P}=c \tag{14.2}$$

$\hat{P}$ 在复空间$\mathscr{V}$中至少有一个本征矢（代数定理）。取一个本征矢 $x\in\mathscr{V}\,(x\neq0)$，设所属的本征值为$c$，则有

$$\hat{P}x=cx \tag{14.3}$$

以$\hat{A}(g)$作用于上式两边，并利用式(14.1)可得

$$\hat{P}[\hat{A}(g)x]=c[\hat{A}(g)x], \qquad g\in G$$

这表明矢量$\hat{A}(g)\,x$ 也是$\hat{P}$的属于本征值 c 的本征矢。因而，本征子空间

$$\mathscr{V}_c=\{x;x\in\mathscr{V},\hat{P}x=cx\} \tag{14.4}$$

在$\hat{A}(g)$下不变。但设$\mathscr{V}$有在$\hat{A}(g)$下不变的真子空间，又$\mathscr{V}_c\neq\{0\}\,(x\neq0)$，故必有

$$\mathscr{V}_c=\mathscr{V} \tag{14.5}$$

这意味着方程(14.3)对空间$\mathscr{V}$中的所有矢量x成立，即有算子等式(14.2)。如在$\mathscr{V}$中取一组基，则方程(14.1)可化为相应的矩阵方程，而(14.2)式化为

$$P=cE \tag{14.6}$$

引理 2 与群G的两个不等价的不可约表示$\hat{A}(g)$和$\hat{B}(g)$有以下关系的线性算子$\hat{M}$等于零

$$\hat{A}(g)\hat{M}=\hat{M}\hat{B}(g), \qquad g\in G \tag{14.7}$$

设$\hat{A}$和$\hat{B}$的表示空间分别为$\mathscr{V}_a$和$\mathscr{V}_b$，则算子$\hat{M}$是将$\mathscr{V}_b$的矢量变为$\mathscr{V}_a$的矢量的线性映射。设$\hat{M}$的核，即$\mathscr{V}_b$中被$\hat{M}$变为0的所有矢量的集合为

$$\mathscr{V}_{b0}=\{x: x\in\mathscr{V}_b,\ \hat{M}x=0\} \tag{14.8}$$

容易验证$\mathscr{V}_{b0}$是$\mathscr{V}_b$的线性子空间。条件(14.7)保证了$\mathscr{V}_{b0}$在$\hat{B}(g)$下不变

$$x\in\mathscr{V}_{b0}\Rightarrow\hat{M}x=0\Rightarrow\hat{M}[\hat{B}(g)x]=\hat{A}(g)\hat{M}x=0\Rightarrow\hat{B}(g)x\in\mathscr{V}_{b0}$$

但$\mathscr{V}_b$没有在$\hat{B}(g)$下不变的真子空间。所以只有两种可能

$$\mathscr{V}_{b0}=\{0\}\text{或}\mathscr{V}_b$$

在第一种情况下，$\hat{M}$将是一一（双方单值）的：如对$\mathscr{V}_b$中的矢量x和y有

$$\hat{M}x=\hat{M}y$$

则有

$$\hat{M}x-\hat{M}y=\hat{M}(x-y)=0\Rightarrow(x-y)\in\mathscr{V}_{b0}\Rightarrow x-y=0$$

即 $x=y$

这时两个空间$\mathscr{V}_a$与$\mathscr{V}_b$是同构的，而(14.7)式表明表示$\hat{A}$和$\hat{B}$是等价的，这与引理的前提不符。故必须

$$\mathscr{V}_{b0}=\mathscr{V}_b \tag{14.9}$$

对照式(14.8)和(14.9)，可见$\hat{M}$将$\mathscr{V}_b$中的所有矢量映射为零。所以$\hat{M}$是零算子

$$\hat{M}=0 \tag{14.10}$$

如果在$\mathscr{V}_a$和$\mathscr{V}_b$中分别取基，则所有算子都可用矩阵表示，这时等式(14.7)和(14.10)都化为相应的矩阵方程。从而得到引理2的矩阵表述

$$A(g)M=MB(g),\ g\in G\Rightarrow M=0 \tag{14.11}$$

其中A和B是G的不等价的不可约矩阵表示，如其維数分别为m和n，则M是m行n列的矩阵。

引理2显然蕴含以下命题：如果对不可约表示$\hat{A}(g)$和

$\hat{B}(g)$存在非零算子$\hat{M}$使(14.6)式成立，则此二表示等价且$\hat{M}$是一一的。

14.2 与给定表示可易的算子（矩阵）

设算子$\hat{T}$与表示$\hat{A}(g)$可易，考查$\hat{T}$在此限制下应具有的一般形状。

设表示$\hat{A}$中含有不可约成分$\hat{A}^{(i)}$的次数为a_i，即有

$$\hat{A}=\sum_i a_i \hat{A}^{(i)} \tag{14.12}$$

$A^{(i)}$的维数为n_i。表示空间$\mathscr{V}$总可以分解为不可约子空间的直和（完全可约性）

$$\begin{aligned}\mathscr{V}=&\mathscr{V}_1{}^{(1)}\oplus\mathscr{V}_2{}^{(1)}\oplus\cdots\oplus\mathscr{V}_{a_1}{}^{(1)}\\&\oplus\mathscr{V}_1{}^{(2)}\oplus\mathscr{V}_2{}^{(2)}\oplus\cdots\oplus\mathscr{V}_{a_2}{}^{(2)}\\&\oplus\cdots\cdots\cdots\end{aligned} \tag{14.13}$$

其中$\mathscr{V}_j{}^{(i)}$表示按不可约表示$\hat{A}^{(i)}$变换的第j个子空间。可以在每个$\mathscr{V}_j{}^{(i)}$中取适当的基，使得等价的不可约成分有相同的矩阵（例如标准矩阵），亦即在$\mathscr{V}_1{}^{(i)}$，$\mathscr{V}_2{}^{(i)}$，…，$\mathscr{V}_{a_i}{}^{(i)}$中取同构基。在此基下，$\hat{A}(g)$的矩阵可以写为

$$A(g)=\begin{pmatrix}A_1(g) & & & & & & \\ & A_2(g) & & & & 0 & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & A_{a_1}(g) & & & \\ & & & & A_{a_1+1}(g) & & \\ & 0 & & & & \ddots & \\ & & & & & & A_{a_1+a_2}(g) \\ & & & & & & & \ddots\end{pmatrix} \tag{14.14}$$

$$\begin{cases}A_1(g)=A_2(g)=\cdots=A_{a_1}(g)=A^{(1)}(g)\\ A_{a_1+1}(g)=A_{a_1+2}(g)=\cdots=A_{a_1+a_2}(g)=A^{(2)}(g)\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\end{cases} \tag{14.15}$$

$\hat{T}$ 的矩阵T可以按与(14.14)相同的格式分块，将第i行第j列上的子块记作T_{ij}（注意此符号在这里不代表阵元）。把对易式

$$A(g)T=TA(g)\quad, g\in G \tag{14.16}$$

按分块矩阵的乘法展开，便得

$$A_i(g)T_{ij}=T_{ij}A_j(g), \quad g\in G \tag{14.17}$$

由 Schur 引理，(14.17)式对子块T_{ij}具有如下的限制（见(14.7)和(14.11)）

$$T_{ij}=\begin{cases} t_{ij}E & ,\ \text{当}A_i(g)=A_j(g) \\ 0 & ,\ \text{当}A_i(g)\neq A_j(g) \end{cases} \tag{14.18}$$

其中t_{ij}为一复数，E为与T_{ij}（或A_i）同阶的单位方阵。对照(14.14)和(14.15)，便可写出：

$$T=\left(\begin{array}{c|c} \begin{matrix} t_{11}E_1, & \cdots, & t_{1a_1}E_1 \\ t_{21}E_1, & \cdots, & t_{2a_1}E_1 \\ \cdots\cdots & & \\ t_{a_11}E_1, & \cdots, & t_{a_1a_1}E_1 \end{matrix} & 0 \\ \hline 0 & \begin{matrix} t_{a_1+1\,a_1+1}E_2 \cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \end{matrix} \end{array}\right) \tag{14.19}$$

其中E_1为$n_i\times n_i$的单位方阵式。(14.19) 就是与式 (14.12)可易的算子在适当基下的标准形状。它具有对角块型：第i个对角块为a_i阶方阵与n_i阶单位方阵的直积，而n和a_i分别为群G的第i个不可约表示的維数和它在给定表示$\hat{A}$中出现的次数。

上述结果也能用另一种方式来表达。现在把在按不可约成分$\hat{A}^{(i)}$变换的a_i个不可约子空间$\mathscr{V}_1^{(i)}$，$\mathscr{V}_2^{(i)}$，…，$\mathscr{V}_{a_i}^{(i)}$中所取的同构基排成下列矩形

$$\left.\begin{array}{l} v_{11}^{(i)},\ v_{12}^{(i)},\ \cdots,\ v_{1n_i}^{(i)}(\mathscr{V}_1^{(i)}\text{的基}) \\ v_{21}^{(i)},\ v_{22}^{(i)},\ \cdots,\ v_{2n_i}^{(i)}(\mathscr{V}_2^{(i)}\text{的基}) \\ \cdots\cdots\quad \cdots\cdots\quad \cdots\cdots \\ v_{a_i1}^{(i)},\ v_{a_i2}^{(i)},\ \cdots,v_{a_in_i}^{(i)}(\mathscr{V}_{a_i}^{(i)}\text{的基}) \end{array}\right\} \tag{14.20}$$

在G的变换g作用下，这个矩形的行按同一个不可约表示的矩阵$A^{(i)}(g)$变换；在与表示$\hat{A}$可易的算子$\hat{T}$的作用下，这个矩形的列按同一个$a_i\times a_i$的矩阵变换。后一半结论可由（14.19）式看出。例如取$i=1$的情形，利用(14.19)式可得

$$\begin{cases} \hat{T}v_{1l}^{(1)}=t_{11}v_{1l}^{(1)}+t_{21}v_{2l}^{(1)}+\cdots+t_{a_11}v_{a_1l}^{(1)} \\ \hat{T}v_{2l}^{(1)}=t_{12}v_{1l}^{(1)}+t_{22}v_{2l}^{(1)}+\cdots+t_{a_12}v_{a_1l}^{(1)} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \end{cases}$$

或写为

$$\hat{T}(v_{1l}^{(1)},\ v_{2l}^{(1)},\ \cdots,\ v_{a_1l}^{(1)})$$

$$=(v_{1l}^{(1)},\ v_{2l}^{(1)},\ \cdots,\ v_{a_1l}^{(1)})\begin{pmatrix} t_{11} & t_{12}\cdots t_{1a_1} \\ t_{21} & t_{22}\cdots t_{2a_1} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ t_{a_11} & t_{a_12}\cdots t_{a_1a_1} \end{pmatrix} \tag{14.21}$$

即第一个基矢矩形中的每个列张成的子空间在$\hat{T}$下都不变，且所有列在$\hat{T}$作用下都按同一矩阵

$$T_1=\begin{pmatrix} t_{11} & t_{12}\cdots t_{1a_1} \\ t_{21} & t_{22}\cdots t_{2a_1} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ t_{a_11} & t_{a_12}\cdots t_{a_1a_1} \end{pmatrix} \tag{14.22}$$

变换。这个结论显然对其它基矢矩形也成立。

不难看出，以上关于T算子性质的两种表达方式是等价的。

显然，如果某矩阵具有形（14.19），则它必与表示$A(g)$（(14.14)）可对易。所以，在$\hat{A}$的不可约基（即使$\hat{A}$完全约化的基）下具有形(14.19)，乃是一个算子与表示$\hat{A}$可易的充要条件。这个命题用纯矩阵的术语来表述应为：矩阵T与群的某矩阵表示A可易，即与所有$A(g)$可易的充要条件是：在同一相似变换下A被完全约化，而T变为形(14.19)。

本节中所叙述的定理对于群的表示理论本身或具体应用都是很重要的，尽管它们在本质上都是与群和群的表示等概念无关的关于算子或矩阵代数的定理。下面只举一例来说明这类抽象的数学结构能为量子力学提供什么好处。

设体系的哈密顿为$\hat{H}$，态矢空间为$\mathscr{V}$。显然$\mathscr{V}$是体系的对称群G的表示空间，而$\hat{H}$与这个表示可对易（见(1.15)）。假定这个表示是完全可约的，则可在$\mathscr{V}$中取不可约基（14.20），使算子$\hat{H}$有形(14.19)。如将这些基矢重新排列，即将每个矩形(14.20)中的基按先第一列，再第二列，……的次序排列，相当于在(14.19)式的每个对角块內进行列调整，则由(14.21)式可以看出，式(14.19)中的每个对角块，又被化为对角块型。例如第一个对角块化出的对角块型中含有n_1个相同的对角块，它们都等于(14.22)式中的T_1。从而可见，在这一表象中，H有形

$$H=\begin{pmatrix} \overbrace{H_1 \quad H_1 \quad \ddots \quad H_1,}^{n_1\text{个}} & & & \\ & \overbrace{H_2 \quad \ddots \quad H_2,}^{n_2\text{个}} & & 0 \\ 0 & & H_3 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{14.23}$$

$$H_i=\begin{pmatrix} h_{11}^{(i)} & h_{12}^{(i)}\cdots h_{1a_i}^{(i)} \\ h_{21}^{(i)} & h_{22}^{(i)}\cdots h_{2a_i}^{(i)} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ h_{a_i1}^{(i)} & h_{a_i2}^{(i)}\cdots h_{a_ia_i}^{(i)} \end{pmatrix} \tag{14.24}$$

或者以基矢 $v_{pl}^{(i)}$ $(p=1,2,\cdots,a_i,\ \ l=1,2,\cdots,n_i)$ 的指标来标记H阵元的行和列，(14.23)和(14.24)式又可表为

$$H_{ipl,i'p'l'}=h_{pp'}^{(i)}\cdot\delta_{ii'}\cdot\delta_{ll'} \tag{14.25}$$

因此H的本征值方程（定态能级的方程）可写为

$$|H-\lambda E|=\prod_i|H_i-\lambda E_i|^{n_i}=0 \tag{14.26}$$

或

$$|H_i-\lambda E_i|^{n_i}=0\qquad,\ i=1,2,\cdots \tag{14.27}$$

其中λ是待定能级，E_i是$a_i\times a_i$的单位方阵。这样一来，H的本征值方程在任意表象中本来是关于λ的$\sum\limits_i a_in_i$次（H的阶）的代数方程，而在对称群的不可约表象中则被简化为各个a_i次的代数方程，并且由第i个方程(14.27)所确定的能级简并度都是n_i的倍数。这种简化和关于简并度的知识是完全由体系的对称性(G)决定的，与相互作用的细节无关。与n_i相应的简并常称为对称简并。特别地，如果某个a_i等于1，即第l个不可约表示在$\mathscr{V}$中只出现1次，则式(14.27)退化为

$$(h_{11}^{(i)}-\lambda)^{n_i}=0 \tag{14.28}$$

这表明，H的阵元$h_{11}^{(i)}$即为1个能级，而相应的本征子空间即为G的n_i維不可约子空间$\mathscr{V}_1^{(i)}$。

由式(14.25)和运动方程(假定$\hat{H}$不显含时间)

$$\Psi(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(0) \tag{14.29}$$

可以看出，在$\hat{H}$的作用下体系不可能发生具有不同i指标或不同l指标的态之间的跃迁。换言之，与量子数i和l相应的力

学量是运动积分。或者说：体系的跃迁只能发生在按其对称群的相同不可约表示（i 指标相同）的同一列（l 指标相同）变换的状态之间，也就是矩形(14.20)的同一列的状态间；并且，这一跃迁的几率与态的 l 指标无关，即与始末态在矩形(14.20)中所处的列无关。这些结论与 $\hat{H}$ 的细节无关，而只由 $\hat{H}$ 的对称性（群 G）决定。

14.3 直积群的表示

设 $G=G_1\times G_2$，我们来研究 G 的任一表示 $\hat{A}(g)$ 的构造。当将 G 的元 g 限于子群 G_1 或 G_2 时，$\hat{A}(g_1)$ 或 $\hat{A}(g_2)$ 将给出子群 G_1 或 G_2 的表示，因此 G 的这个表示所作用的空间 $\mathscr{V}$ 同时也是 G 的两个子群 G_1 和 G_2 的表示空间

$$g_1g_2=g_2g_1\Rightarrow\hat{A}(g_1)\hat{A}(g_2)=\hat{A}(g_2)\hat{A}(g_1)$$

表明这样得到的 G_1 和 G_2 的两个表示是互易的。现将空间 $\mathscr{V}$ 按 G_1 的不可约表示来约化，由前面的结果，可将 $\mathscr{V}$ 的基排成一些形如(14.20)的矩形，使得矩形的每一行都按 G_1 的不可约表示 $B^{(i)}(g_1)$ 变换，而矩形的每一列将按 G_2 的同一个表示 $C(g_2)$ 变换。但 G_2 的表示 $C(g_2)$ 可能是可约的，这时可将矩形每个列中的基进行重新组合，使基按 G_2 的不可约表示约化（注意所有列的组合系数是相同的，因为这些列按 G_2 的同一个表示 $C(g_2)$ 变换）。这样，原矩形将被约化为 n 个行数较小的新矩形，它的行仍按 G_1 的不可约表示 $B^{(i)}(g_1)$ 变换，而列将按 G_2 的不可约表示 $C^{(j)}(g_2)$ 变换。即有

$$C(g_2)\left\{\begin{array}{l}\overbrace{v_{11}^{(i)},\ v_{12}^{(i)},\ \cdots,\ v_{1n_i}^{(i)}}^{B^{(i)}(g_1)}\\ v_{21}^{(i)},\ v_{22}^{(i)},\ \cdots,\ v_{2n_i}^{(i)}\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\ v_{a_i1}^{(i)},\ v_{a_i2}^{(i)},\ \cdots,\ v_{a_in_i}^{(i)}\end{array}\right.$$

$$\begin{array}{c} B^{(i)}(g_1) \\ \overbrace{\begin{array}{|c|} \hline \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \hline \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ v_{k1}^{(j,i)},\ v_{k2}^{(j,i)},\cdots,v_{kn_i}^{(j,i)} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \hline \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \end{array}} \end{array} \left.\vphantom{\begin{array}{c}a\\a\\a\\a\\a\\a\end{array}}\right\} C^{(j)}(g) \quad (14.30)$$

结果$\mathscr{V}$的基被排成一些形如(14.30)中的框内的矩形，其行和列分别按G_1的不可约表示$B^{(i)}(g_1)$和G_2的不可约表示$C^{(j)}(g_2)$变换。每个这样的矩形张成G的表示$\hat{A}(g)$的一个不变子空间

$$\begin{aligned} \hat{A}(g)v_{kl}^{(j,i)} &= \hat{A}(g_1g_2)v_{kl}^{(j,i)} = \hat{A}(g_1)\hat{A}(g_2)v_{kl}^{(j,i)} \\ &= \hat{A}(g_1)\sum_{k'=1}^{m_j} v_{k'l}^{(j,i)}C_{k'k}^{(j)}(g_2) = \sum_{k'=1}^{m_j}[\hat{A}(g_1)v_{k'l}^{(j,i)}]C_{k'k}^{(j)}(g_2) \\ &= \sum_{k'=1}^{m_j}\sum_{l'=1}^{n_i} v_{k'l'}^{(j,i)}B_{l'l}^{(i)}(g_1)C_{k'k}^{(j)}(g_2) \end{aligned} \quad (14.31)$$

其中n_i和m_j分别为表示$B^{(i)}(g_1)$和$C^{(j)}(g_2)$的維数，而

$$g = g_1g_2 \in G,\ g_1 \in G_1,\ g_2 \in G_2 \quad (14.32)$$

这个子空间确定了G的一个$n_i \times m_j$維表示，即$\hat{A}(g)$在子空间上的缩小$A'(g)$。(14.31)式表明

$$A'(g) = B^{(i)}(g_1) \otimes C^{(j)}(g_2) \quad (14.33)$$

从而我们得到结论：直积群的任何一个表示都可以约化为这样一些表示的直和，其中每个表示都是两个因子群的不可约表示的直积(14.33)。特别地，若$\hat{A}(g)$是G的不可约表示，则$\mathscr{V}$中沒有$\hat{A}$的不变眞子空间，这时$\mathscr{V}$的基只能由一矩形组成，而式(14.33)便成为

$$A(g) = B^{(i)}(g_1) \otimes C^{(j)}(g_2) \quad (14.34)$$

这又表明：直积群的每个不可约表示都可表为两个因子群的不可约表示的直积(14.34)。因此，直积群的所有不可约表示，可由其因子群的所有不可约表示的一切可能的直积来构成。这

个定理使得构造直积群的不可约表示的完整表的问题大为简化：只需知道因子群的不可约表示的完整表。

§15 例子——一些简单羣的表示

群表示理论的基本问题之一是构造已知群的全部不等价的不可约表示。在一般情况下，这并不是一个简单的问题，也没有一个统一的简单处理方法（见后文关于李群和置换群的讨论）；但对于一些比较简单的群，则不必引用特殊技巧，只需从一般定义出发经简单讨论来解决。下面列举一些这类例子。

15.1 循环群的表示

n 阶循环群 $G=\{a, a^2, \cdots, a^{n-1}, a^n=e\}$，是阿贝尔群，因而只有一維的不可约表示，請读者用 Schur 引理加以证明。设 $A(g)$ 是 G 的一个不可约表示——注意这里 A 是 1×1 的矩阵，即复数，则有

$$A^n(a)=A(a^n)=A(e)=1$$

解出 n 个根

$$A(a)=e^{2\pi i/n},\ e^{4\pi i/n},\ e^{6\pi i/n},\ \cdots,\ e^{2\pi i}=1$$

每个根确定 G 的一个不可约表示。所以，n 阶的循环群共有 n 个不同(不等价)的不可约表示。在这些表示中，生成元 a 的矩阵（数）分别为

$$A^{(1)}(a)=1,\ A^{(2)}(a)=e^{2\pi i/n},\ \cdots,\ A^{(n)}(a)=e^{2\pi i\frac{n-1}{n}} \tag{15.1}$$

由同态关系，在每个表示中任意元 a^m 的矩阵可用生成元矩阵的 m 次幂表示，即

$$A^{(i)}(a^m)=[A^{(i)}(a)]^m \tag{15.2}$$

例如，与点群 C_3 同构的交代群 $A_3=\{(1),(123),(123)^2\}$ 是三阶的循环群，生成元可取为 $a=(123)$，它的三个不可约表示可列成下表：

	(1)	(123)	$(123)^2$
$A^{(1)}$	1	1	1
$A^{(2)}$	1	$e^{2\pi i/3}$	$e^{4\pi i/3}$
$A^{(3)}$	1	$e^{4\pi i/3}$	$e^{2\pi i/3}$

(15.3)

15.2 有限可换群的表示

考虑点群$C_{2v}=\{I, C_2, \sigma_v, \sigma_d\}$，它的对称元素为一个二次转轴和通过此轴的两个互相垂直的映面。这是一个四阶的非循环可换群，在同构意义下只有一个这样的群，它只有一維的不可约表示。可以沿如下思路得到它的所有不可约表示。

首先，C_{2v}有直积结构($C_2=\sigma_v\sigma_d$)

$$C_{2v}=\{I, \sigma_v\}\times\{I, \sigma_d\} \tag{15.4}$$

由此可知，C_{2v}的全部不可约表示可由两个子群的不可约表示的一切可能的直积给出；而两个子群都是循环群，它们的表示可由前面的办法写出

	I	σ_v
$B^{(1)}$	1	1
$B^{(2)}$	1	-1

	I	σ_d
$C^{(1)}$	1	1
$C^{(2)}$	1	-1

(15.5)

按(14.33)式，C_{2v}共有$2\times2=4$个不可约表示，它们是

	I	C_2	σ_v	σ_d	
$A^{(1)}$	$1\times1=1$	$1\times1=1$	$1\times1=1$	$1\times1=1$	$B^{(1)}\otimes C^{(1)}$
$A^{(2)}$	$1\times1=1$	$1\times(-1)=-1$	$1\times1=1$	$1\times(-1)=-1$	$B^{(1)}\otimes C^{(2)}$
$A^{(3)}$	$1\times1=1$	$(-1)\times1=-1$	$(-1)\times1=-1$	$1\times1=1$	$B^{(2)}\otimes C^{(1)}$
$A^{(4)}$	$1\times1=1$	$(-1)\times(-1)=1$	$(-1)\times1=-1$	$1\times(-1)=-1$	$B^{(2)}\otimes C^{(2)}$

(15.6)

当然这个结果也可以用群元的运算关系

$$C^2=\sigma_v^2=\sigma_d^2=1,\ C_2=\sigma_v\sigma_d$$

直接得到。但上面所示的方法对于可换群具有普遍意义。

可以证明：有限可换群能够表为循环群的直积（关于有限可换群的基本定理）[16]。利用这一点，我们就能通过有限可换群的直积分解和循环群的表示，作出任意有限可换群的全部不可约表示。如果

$$G=G_1\times G_2\times\cdots\times G_r \tag{15.7}$$

而循环群G_i的生成元为a_i，则G的任意元能够唯一地表为

$$g=a_1^{m_1}a_2^{m_2}\cdots a_r^{m_r} \tag{15.8}$$

其中$m_i=1$，2，…，$N(G_i)$；$N(G_i)$是G的阶。这样，由G_i的第k_i个不可约表示$B_i^{(k_i)}$（$i=1$，2，…，r）作出的G的不可约表示为

$$A(g)=\prod_{i=1}^{r}[B_i^{(k_i)}(a_i)]^{m_i} \tag{15.9}$$

因为G_i的不可约表示有$N(G_i)$个，则G的不可约表示(15.9)应有$N(G_1)\times N(G_2)\times\cdots\times N(G_r)=N(G)$个。可见：有限可换群的不可约表示的数目等于群的阶。

注意到(15.1)、(15.2)式，有

$$B_l^{(k_l)}(a_l)=e^{2\pi i\frac{k_l}{N_l}} \tag{15.10}$$

其中$N_l=N(G_l)$，(15.9)式也可明显地写为

$$A(g)=e^{2\pi i\left[\frac{k_1}{N_1}m_1+\frac{k_2}{N_2}m_2+\cdots+\frac{k_r}{N_r}m_r\right]} \tag{15.11}$$

其中$(m_1, m_2, \cdots, m_r)$是群元$g\in G$的指标；而$(k_1, k_2, \cdots, k_r)$则是区分不同的表示A的指标。

15.3 置换群 S_3 与点群C_{3v}的表示

$S_3\cong C_{3v}$是6阶的非可换群，在同构意义下，这是最低阶的唯一的非可换群，它存在高于一維的不可约表示。下面来建立S_3的不可约表示。将S_3的元换为C_{3v}的对应（同构）元，例如

将(123)⟶C_3，(12)⟶$\sigma_v^{(3)}$便得到C_{3v}的表示。

设$\mathscr{V}$是S_3的一个不可约表示空间，作用于$\mathscr{V}$的不可约表示算子为$\hat{A}(g)(g\in S_3)$，则$\mathscr{V}$在算子$\hat{A}$[(123)]和$\hat{A}$[(12)]下不变，且沒有不变的眞子空间。这个条件足以确定两个算子矩阵的一切可能形式；再由同态关系和生成元的定义知，一个表示的所有矩阵完全可由生成元的矩阵定出，这样就能得到S_3的全部不可约表示。

首先，$\mathscr{V}$也是子群A_3的表示空间。按完全可约性定理，$\mathscr{V}$可按A_3约化，卽$\mathscr{V}$的基矢都按A_3的某个不可约表示变换

$$\hat{A}[(123)]\psi_m=e^{2\pi i\frac{m}{3}}\psi_m,\quad m=0,\ 1,\ 2 \tag{15.12}$$

当基矢中有一个ψ_0时，不可能再有其它基矢出现，而$\mathscr{V}$就是由ψ_0张成的一維空间。这是因为，$\mathscr{V}$中的矢量$(\psi_0\pm\hat{A}[(12)]\psi_0)$都张成在$\hat{A}[(123)]$和$\hat{A}[(12)]$下不变的一維子空间

$$\begin{aligned}&\hat{A}[(123)](\psi_0\pm\hat{A}[(12)]\psi_0)\\&=\psi_0\pm\hat{A}[(123)(12)]\psi_0=\psi_0\pm\hat{A}[(12)(123)^2]\psi_0\\&=\psi_0\pm\hat{A}[(12)]\hat{A}^2[(123)]\psi_0=\psi_0\pm\hat{A}[(12)]\psi_0\end{aligned}$$

又

$$\begin{aligned}&\hat{A}[(12)](\psi_0\pm\hat{A}[(12)]\psi_0)\\&=\hat{A}[(12)]\psi_0\pm\hat{A}[(12)^2]\psi_0=\hat{A}[(12)]\psi_0\pm\psi_0\\&=\pm(\psi_0\pm\hat{A}[(12)]\psi_0)\end{aligned}$$

如果这两个矢量线性无关，则$\mathscr{V}$有两个一維不变眞子空间。这与$\mathscr{V}$是不可约的假定矛盾，故此二矢量必须相关，从而$\hat{A}[(12)]\psi_0$与ψ_0相关

$$\hat{A}[(12)]\psi_0=\lambda\psi_0 \tag{15.13}$$

卽ψ_0张成一个一維不变子空间，且由于$\mathscr{V}$不可约，这个不变子空间卽为$\mathscr{V}$本身。又由式(15.13)和$(12)^2=(1)$推知

$$\lambda=\pm 1 \tag{15.14}$$

于是便得到S_3的两个一維表示

	(123)	(12)
$A^{(1)}$	1	1
$A^{(2)}$	1	−1

(15.15)

当基矢中没有ψ_0时，必有ψ_1或ψ_2出现；事实上ψ_1和ψ_2将同时出现并张成一个二維不变子空间。设$\psi_1\in\mathscr{V}$，则必有$\hat{A}[(12)]\psi_1\in\mathscr{V}$（$\mathscr{V}$在$\hat{A}(g)$下不变），但

$$\hat{A}[(123)]\hat{A}[(12)]\psi_1=\hat{A}[(12)]\hat{A}[(123)]^2\psi_1$$
$$=e^{4\pi i/3}\hat{A}[(12)]\psi_1 \tag{15.16}$$

表明$\hat{A}[(12)]\psi_1$按子群A_3的$m=2$的不可约表示变换，即有

$$\hat{A}[(12)]\psi_1=\psi_2 \tag{15.17}$$

在$\hat{A}[(123)]$作用下ψ_1和ψ_2分别乘以常数$e^{2\pi i/3}$和$e^{4\pi i/3}$，在$\hat{A}[(12)]$作用下ψ_1和ψ_2互换。可见，$\{\psi_1, \psi_2\}$张成$\mathscr{V}$的一个在$\hat{A}(g)$下不变的子空间。但$\mathscr{V}$是不可约的，因而这个二維子空间必为$\mathscr{V}$本身。于是又得到S_3的一个二維表示

$$A^{(3)}[(123)]=\begin{pmatrix} e^{2\pi i/3} & 0 \\ 0 & e^{4\pi i/3} \end{pmatrix},\quad A^{(3)}[(12)]=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{15.18}$$

这两个矩阵不可易，不能同时对角化，说明这个表示是不可约的。

由于我们对不可约空间$\mathscr{V}$未作任何附加限制，以上讨论了一切可能的情形，所以所得到的已是S_3的全部不可约表示。总之S_3（或C_{3v}）只有三个不可约表示（等价的算作同一个），两个一維的，一个二維的（(15.15)）。

二維不可约的表示的矩阵（15.18）也可以取其它的等价形式。例如通过矩阵

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} \tag{15.19}$$

作相似变换可将(15.18)式化为实形

$$S^{-1}A^{(3)}[(123)]S=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$S^{-1}A^{(3)}[(12)]S=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{15.20}$$

将(15.20)与§11.1中的例1比较，可以看出：当将$A^{(3)}$做为C_{3v}的表示时，它就是C_{3v}的自然表示中的二維不可约成分。等价形式(15.18)与(15.20)的区别在于：前者是使元素(123)(或C_3)的矩阵对角化的，后者是使元素(12)(或$\sigma_v^{(3)}$)对角化的。

15.4 定轴转动群$SO(2)$的表示

这个群可以看作为三維（实）空间中的定轴转动群或二維（实）空间中的转动群或2×2的（实）正交单模矩阵群．这三种看法显然是等价的，即“三个”群是同构的。这是一个单参数李群，当以转角φ为参数时，群元的乘法公式为

$$\begin{cases}g(\varphi+\varphi')=g(\varphi)g(\varphi')\\ g(0)=g(2\pi)=e\end{cases} \tag{15.21}$$

由于它是可换群，所以只有一維的不可约表示。下面设法作出它的所有可微的不可约表示。

若$A(\varphi)=A[g(\varphi)]$是一个这样的表示，则由式(15.21)知必有

$$\begin{cases}A(\varphi+\varphi')=A(\varphi)A(\varphi')\\ A(2\pi)=A(0)=1\end{cases} \tag{15.22}$$

将(15.22)中的第一式两边对φ'求导并令$\varphi'=0$，得$A'(\varphi)=A'(0)A(\varphi)$，解出$A(\varphi)=ce^{A'(0)\varphi}$；代入第二式得$c=1$，$A'(0)=im$，$m=0$，±1，±2，……。总之，(15.22)式所决定的一切可能的可微函数为

$$A^{(m)}(\varphi)=e^{im\varphi},\ m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots \qquad (15.23)$$

这就是$SO(2)$的全部可微的不可约表示。

$SO(2)$的矩阵形式也可以看作是它本身的一个忠实(自然)表示

$$g(\varphi)\longrightarrow\begin{pmatrix}\sin\varphi & -\sin\varphi\\ \cos\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix} \qquad (15.24)$$

这个表示当然是可约的（二維）。事实上它可以通过幺正矩阵(15.19)的逆矩阵约化为

$$S\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi\\ \sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix}S^{-1}=\begin{pmatrix}e^{i\varphi} & 0\\ 0 & e^{-i\varphi}\end{pmatrix}$$

$$=A^{(1)}(\varphi)\oplus A^{(-1)}(\varphi)$$

$SO(2)$的任二不可约表示的直积也只能是一維的，因而也是一个不可约表示。由(15.23)式可以看出不可约表示直积的约化公式为

$$A^{(m)}(\varphi)\otimes A^{(m')}(\varphi)=A^{(m+m')}(\varphi) \qquad (15.25)$$

在一維情况下这是显然的。

15.5 定轴转动——反映群$O(2)$的表示

$O(2)$除了包含$SO(2)$的全部转动操作外，还包含对于通过转轴的任一平面的反映操作及其与转动的乘积，它的矩阵形式为2×2的（实）正交矩阵的群。如前所述，它是正圆锥体或$A-B$型的线性分子的对称群，是非可换的，其点群符号为$C_{\infty v}$。前面已将这个群参数化了：連续参数φ为转角，分立参数$\xi=\det g=\pm1$用以区分纯转动和反映转动两类操作；并且有乘法公式

$$g(\varphi,\ \xi)g(\varphi',\ \xi')=g(\xi'\varphi+\varphi',\ \xi\xi') \qquad (15.26)$$

简化得

$$C(\varphi)=g(\varphi,1),\quad \sigma=g(0,-1) \qquad (15.27)$$

其中C表纯转动；σ表反映，例如可取为$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$。显然整个$O(2)$可由$C(\varphi)$和$\sigma$来生成（注意式(15.26)）

$$g(\varphi,\ \xi)=\begin{cases}C(\varphi) & ,\ \xi=1\\ \sigma C(\varphi) & ,\ \xi=-1\end{cases} \tag{15.28}$$

因而我们只需写出任意表示$\hat{A}$对于群元$C(\varphi)$和σ的矩阵$\hat{A}(\varphi)$和$\hat{A}(\sigma)$，一般元的矩阵可由它们生成

$$\hat{A}(\varphi,\ \xi)=\begin{cases}\hat{A}(\varphi) & ,\quad \xi=1\\ \hat{A}(a)\hat{A}(\varphi), & \quad \xi=-1\end{cases} \tag{15.29}$$

此外，式(15.26)还蕴含以下有用的对易式

$$C(\varphi)\sigma=\sigma C(-\varphi) \tag{15.30}$$

（也可由§2中关于点操作的运算法则或作简单的几何考虑直接写出）从而有

$$\hat{A}(\varphi)\hat{A}(\sigma)=\hat{A}(\sigma)\hat{A}(-\varphi) \tag{15.31}$$

下面仿照处理S_3的思路来建立$O(2)$的不可约表示。要点是将这些表示取为作为子群$SO(2)$的表示是已经约化了的形式。设$\mathscr{V}$是$O(2)$的任意不可约表示空间，$\hat{A}(\varphi,\ \xi)$是作用于$\mathscr{V}$上的不可约表示。$\mathscr{V}$可以按子群$SO(2)$的不可约表示完全约化，其基矢在$\hat{A}(\varphi)$下都按$SO(2)$的不可约表示变换

$$\hat{A}(\varphi)\psi_m=e^{im\varphi}\psi_m \tag{15.32}$$

若$\mathscr{V}$中有基矢ψ_m，则矢量$\psi_m'=\hat{A}(\sigma)\psi_m\in\mathscr{V}$，因而$\psi_m$和$\psi_m'$张成$\mathscr{V}$的一个子空间。注意到

$$\hat{A}^2(\sigma)=\hat{A}(\sigma^2)=I \tag{15.33}$$

而利用式(15.31)和(15.32)可得

$$\begin{cases}\hat{A}(\varphi)(\psi_m,\ \psi_m')=(\psi_m,\ \psi_m')\begin{pmatrix}e^{im\varphi} & 0\\ 0 & e^{-im\varphi}\end{pmatrix}\\ \hat{A}(\sigma)(\psi_m,\ \psi_m')=(\psi_m,\ \psi_m')\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\end{cases} \tag{15.34}$$

这表明，ψ_m和ψ_m'张成的子空间在$\hat{A}(g)$下不变。由于$\mathscr{V}$是不可约的，这个子空间必为整个$\mathscr{V}$。所以$\mathscr{V}$至多是二维的。由(15.34)的第一式可以看出，矢量ψ_m'实为ψ_{-m}型基矢，即$\psi_{\pm m}$型基是成对出现的，其中必有一个脚标是非负的。故可认为原先所取的ψ_m是$m\geqslant 0$的那一个或将式(15.34)中的m改为$\Lambda=|m|$。

当$\Lambda=0$时，必有

$$\psi_0'=\lambda\psi_0 \tag{15.35}$$

否则由ψ_0和ψ_0'张成的二维空间$\mathscr{V}$将是可约的：$\psi_0\pm\psi_0'$张成两个一维不变子空间。又由(15.33)式推知

$$\lambda=\pm 1 \tag{15.36}$$

可见这时$\mathscr{V}$是一维的（由ψ_0张成），并由(15.36)式得到两个可能的一维表示

$$A^{(0+)}(\varphi)=1\quad,\qquad A^{(0+)}(\sigma)=1$$
$$A^{(0-)}(\varphi)=1\quad,\qquad A^{(0-)}(\sigma)=-1$$

或更完整地写为

$$A^{(0^+)}(\varphi,\ \xi)=1 \tag{15.37}$$

$$A^{(0^-)}(\varphi,\ \xi)=\xi \tag{15.38}$$

当$\Lambda>0$时，表示空间$\mathscr{V}$由ψ_Λ和ψ_Λ'张成。由式(15.34)知，这个二维表示的矩阵为

$$A^{(\Lambda)}(\varphi)=\begin{pmatrix} e^{i\Lambda\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\Lambda\varphi}\end{pmatrix}\quad,\quad A^{(\Lambda)}(\sigma)=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{15.39}$$

或写为（注意(15.29)）

$$A^{(\Lambda)}(\varphi,\ \xi)=\begin{cases}\begin{pmatrix} e^{i\varphi\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\Lambda\varphi}\end{pmatrix}, & \xi=1 \\ \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\Lambda\varphi} \\ e^{i\Lambda\varphi} & 0\end{pmatrix}, & \xi=-1\end{cases} \tag{15.40}$$

这样已经得到了O(2)群的一切可能的不可约表示，共有

两个一維的，无穷个二維的

$$A^{(0^+)},\ A^{(0^-)},\ A^{(1)},\ A^{(2)},\ \cdots\cdots$$

上面的二維表示矩阵采取了这样一种形式：当它作为子群$SO(2)$的表示时是完全约化了的。也可以采取其它等价形式。例如，可以通过S矩阵(15.19)将(15.40)化为实型

$$S^{-1}A^{(\Lambda)}(\varphi,\ \xi)S=\begin{cases}\begin{pmatrix}\cos\Lambda\varphi & -\sin\Lambda\varphi\\ \sin\Lambda\varphi & \cos\Lambda\varphi\end{pmatrix}, & \xi=1\\ \begin{pmatrix}\cos\Lambda\varphi & -\sin\Lambda\varphi\\ -\sin\Lambda\varphi & -\cos\Lambda\varphi\end{pmatrix}, & \xi=-1\end{cases}\tag{15.41}$$

这时，反映σ的矩阵具有对角形($\varphi=0$，$\xi=-1$)

$$S^{-1}A^{(\Lambda)}(\sigma)S=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\tag{15.42}$$

最后我们来讨论$O(2)$群直积表示的约化问题。显然任二一維表示的直积仍是一个一維表示；一个一維表示与一个二維表示的直积等价于原来的二維表示。两个二維表示的直积$A^{(\Lambda)}\otimes A^{(\Lambda')}$的表示空间为两个表示空间的直积，由四个矢量

$$\psi_\Lambda\varphi_{\Lambda'},\ \psi_\Lambda\varphi_{-\Lambda'},\ \psi_{-\Lambda}\varphi_{\Lambda'},\ \psi_{-\Lambda}\varphi_{-\Lambda'}$$

张成。为了约化这个四維表示，需要将四个基矢重新组合，使新基分组张成不变子空间。显然$\psi_\Lambda\varphi_{\Lambda'}$与$\psi_{-\Lambda}\varphi_{-\Lambda'}$在操作$C(\varphi)$下相当于分别乘以$e^{i(\Lambda+\Lambda')\varphi}$和$e^{-i(\Lambda+\Lambda')\varphi}$，而在$\sigma$下互换。所以它们张成一个二維不变子空间，而且按不可约表示$A^{(\Lambda+\Lambda')}$变换。同理，当$\Lambda\neq\Lambda'$时，$\psi_\Lambda\varphi_{-\Lambda'}$和$\psi_{-\Lambda}\varphi_{\Lambda'}$张成按不可约表示$A^{(\Lambda-\Lambda')}$变换的子空间；当$\Lambda=\Lambda'$时，$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\Lambda\varphi_{-\Lambda}+\psi_{-\Lambda}\varphi_\Lambda)$和$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\Lambda\varphi_{-\Lambda}-\psi_{-\Lambda}\varphi_\Lambda)$分别张成一个一維不变子空间，并按不

可约表示$A^{(0^+)}$和$A^{(0^-)}$变换。从而有

$$A^{(\Lambda)}\otimes A^{(\Lambda')}=\begin{cases}A^{(\Lambda+\Lambda')}\oplus A^{(|\Lambda-\Lambda'|)}, & \Lambda\neq\Lambda'\\ A^{(2\Lambda)}\oplus A^{(0^+)}\oplus A^{(0^-)}, & \Lambda=\Lambda'\end{cases}\tag{15.43}$$

上式中的等号是在等价的意义下使用的。上面的分析同时给出了约化矩阵。例如，当$\Lambda=\Lambda'$时，这个矩阵为

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\tag{15.44}$$

15.6 点群 $D_{\infty h}=O(2)\times C_i$ 的表示

这个群可由群$O(2)$加入反演操作i扩充而成。$O(2)$和C_i显然是它的两个子群，因i与任意点操作可易，$D_{\infty h}$便可写成两个子群的直积。它是圆柱体或A——A型线性分子的对称群。

$D_{\infty h}$的全体不可约表示可由$O(2)$与C_i的不可约表示的直积作出。$O(2)$的不可约表示前面已经给出；$C_i=\{I,\ i\}$的两个不可约表示都是一维的：一个是单位表示，另一个对i取值(-1)。注意到$D_{\infty h}$的每个元都可唯一地表示为$O(2)$的元$g(\varphi,\ \xi)$与$C_i=\{I,\ i\}$元的乘积：$g(\varphi,\ \xi)$或$g(\varphi,\ \xi)i$，于是可写出$D_{\infty h}$的不可约表示$A_+^{(\Lambda)}$，$A_-^{(\Lambda)}$：

$$A_+^{(\Lambda)}[g(\varphi,\xi)]=A^{(\Lambda)}(\varphi,\xi),\quad A_+^{(\Lambda)}[g(\varphi,\xi)i]=A^{(\Lambda)}(\varphi,\xi)$$

$$A_-^{(\Lambda)}[g(\varphi,\xi)]=A^{(\Lambda)}(\varphi,\xi),\quad A_-^{(\Lambda)}[g(\varphi,\xi)i]=-A^{(\Lambda)}(\varphi,\xi)$$

$$\Lambda=0^+,\ 0^-,\ 1,\ 2,\ \cdots\cdots$$

如在$D_{\infty h}$中引入新的参数$\eta=\pm1$

$$g(\varphi,\xi,\eta)=\begin{cases}g(\varphi,\xi), & \eta=+1\\ g(\varphi,\xi)i, & \eta=-1\end{cases}\tag{15.45}$$

则所得的表示可更简捷地写为

$$\begin{cases} A_{+}^{(\Lambda)}(\varphi,\xi,\eta)=A^{(\Lambda)}(\varphi.\xi) \\ A_{-}^{(\Lambda)}(\varphi,\xi,\eta)=\eta A^{(\Lambda)}(\varphi,\xi) \\ \Lambda=0^{+},\ 0^{-},\ 1,\ 2,\ \cdots\cdots \end{cases} \qquad (15.46)$$

可见 $D_{\infty h}$ 有四个一維表示和无穷个二維表示。

第四章　有限群的表示

在上一章中建立了群表示理论的一般概念和基本原理。对于有限群的表示，借助于群代数和正则表示的概念以及特征标理论，还可以得到一些更进一步的结果。其中的部分结果的成立，并非一定要求群元是有限的，只要求群上的不变和存在，因而可以推广到紧致的連续群中去。

本章将按上述方法建立在应用上非常重要的关于不可约表示的个数和維数的定理，关于不可约表示和单纯特征标的正交性定理；并利用对称化算子建立一种将表示约化的实际方法；做为例子，还将讨论32个晶体点群的单纯特征标和不可约表示的具体计算方法——对基础点群给出具体结果，而其余点群可表为同构于它们的直积。

§16　羣代数与正则表示

16.1　群代数

由N阶群 $G=\{g,h,s,\cdots\cdots\}$ 可以产生一个N維复线性空间，只要令N个群元为这个空间的基矢。这一规定意味着：1°把N个群元看作是空间中的矢量时，它们是线性独立的；2°空间中的任意矢量是这N个特殊矢量（群元）的线性组合；3°两个矢量之和的展开系数为两者的展开系数之和，一个矢量与一复数乘积的展开系数为这矢量的展开系数与所乘的复数之积。这个矢量空间显然同构于N个复数的数组的矢量空间。

现在要把G内的乘法运算推广到由G产生的那个矢量空间中去。这也就是要将做为基矢的群元之间的已知乘法推广到一般矢量

$$\hat{v}=\sum_{g}v_{g}\hat{g} \tag{16.1}$$

之间去。这一推广可由下面一个要求完全决定：乘法对于两个因子矢量都是线性的（双线性）。于是有

$$\hat{u}\hat{v}=(\sum_{s}u_{s}\hat{s})(\sum_{g}v_{g}\hat{g})=\sum_{s,g}u_{s}v_{g}\hat{s}\hat{g} \tag{16.2}$$

其中$\hat{s}\hat{g}$即G内的乘法，是已知的。这样一来，在由(16.1)形的元$\hat{v}$（v_g是复数）所形成的集合内存在着或者说定义了三种运算：加法、数乘、乘法。对于前两种运算，它成为一个矢量（线性）空间，而后一种运算满足结合律且对于前两种运算是双线性的。这样一个代数系统在数学中称为“代数”，代数的維数是指它作为矢量空间的維数。例如，具有任意复数元素的$n\times n$矩阵的全体，对于矩阵的加法、数乘、乘法运算形成一个n^2維代数。

由群G产生的代数称为G的群代数。G的群代数的維数显然等于G的阶。例如，点群C_{3v}的群代数是6維的，它的“自然基”是C_{3v}的6个元I，C_3，C_3^2，$\sigma_v^{(1)}$，$\sigma_v^{(2)}$，$\sigma_v^{(3)}$（经任一满秩的变换可变为另一组基），它的任意元可写为

$$u=u_1I+u_2C_3+u_3C_3^2+u_4\sigma_v^{(1)}+u_5\sigma_v^{(2)}+u_6\sigma_v^{(3)}$$

利用C_{3v}的乘法表不难得到任意二元的乘积公式（代入(16.2)）：

$$\begin{aligned}uv=&(u_1v_1+u_2v_2+u_3v_3+u_4v_4+u_5v_5+u_6v_6)I\\&+(u_1v_2+u_2v_1+u_3v_3+u_4v_5+u_5v_6+u_6v_4)C_3\\&+(u_1v_3+u_2v_2+u_3v_1+u_4v_6+u_5v_4+u_6v_5)C_3^2\\&+(u_1v_4+u_2v_5+u_3v_6+u_4v_1+u_5v_3+u_6v_2)\sigma_v^{(1)}\\&+(u_1v_5+u_2v_6+u_3v_4+u_4v_2+u_5v_1+u_6v_3)\sigma_v^{(2)}\\&+(u_1v_6+u_2v_4+u_3v_5+u_4v_3+v_5v_2+u_6v_1)\sigma_v^{(3)}\end{aligned}$$

考虑群代数中与所有元可对易的元。容易看出，同一类群元的和

$$\hat{K}=\sum_{g\in K}\hat{g} \tag{16.3}$$

便是这样的元。这个元显然与G的每个元可易（$\hat{g}\hat{K}\hat{g}^{-1}=\hat{K}$，$g\in G$），因而也必与群元的任意组合即群代数的元可易。由此又进一步推知，具有形(16.3)的元的任意组合

$$\hat{w}=\sum_K w_K\hat{K} \tag{16.4}$$

也是群代数中与所有元可易的元($\sum_K$表对G的所有的类求和)。事实上，(16.4)式已经包含了群代数中全部这样的元。设

$$\hat{w}=\sum_{g\in G}w_g\hat{g}$$

是一个这样的元，我们来证明它必有式(16.4)的形状。$\hat{w}$既然与群代数的所有元可易，必与G的元可易

$$\hat{s}\hat{w}\hat{s}^{-1}=\sum_g w_g\hat{s}\hat{g}\hat{s}^{-1}=\sum_g w_{s^{-1}gs}\hat{g}=\hat{w}=\sum_g w_g\hat{g}$$

由于诸$\hat{g}$线性无关，上式要求

$$w_{s^{-1}gs}=w_g,\quad g\in G$$

即$\hat{w}$对于相互共轭的元有相同的分量，即有相同的组合系数。换言之，w_g是G的类函数。可写

$$w_g=w_K, g\in K$$

从而得

$$\hat{w}=\sum_g w_g\hat{g}=\sum_K\sum_{g\in K}w_g\hat{g}=\sum_K w_K\sum_{g\in G}\hat{g}=\sum_K w_K\hat{K}$$

此即(16.4)式。

群代数中与所有元可易的元的全体称为群代数的“中心”。显然，“中心”在群代数的三种基本运算下都是封闭的，所以它构成群代数的一个子代数。特别地，把群代数做为矢量空间看待时，中心形成一个子空间。前面证明了，群代数的中心由具有形(16.4)的所有元构成。诸$\hat{g}$的独立性，蕴含着诸$\hat{K}$的独立

性。所以，（16.4）式表明：群代数的中心的維数等于群的类数，而且诸$\hat{K}$形成了中心的一组“自然基”。例如，C_{3v}的群代数的中心是3維的子代数，其自然基为

$$K_1 = I$$
$$K_2 = C_3 + C_3^2$$
$$K_3 = \sigma_v^{(1)} + \sigma_v^{(2)} + \sigma_v^{(3)}$$

实际上，群代数的概念比群本身更为有用。当我们将群的元理解为作用于态矢上的线性算子时，我们不但要考虑这些算子的本身，还要考虑它们的函数，这些函数和体系的哈密顿算子对易。假定所涉及的函数是充分正规的，则可以表为群元的幂级数。注意到群元的幂和积仍为群元，所说的幂级数总可表示为群元的线性组合。因此，所要考虑的只是群元及其线性组合，这便是体系对称群的群代数。在量子力学中，对于较为复杂的体系，为了标记其定态，须建立一批与哈密顿算子对易又彼此互易的算子。例如我们问：如果已知体系的对称群为G，由这一对称性能建立多少个这样的算子？上面的分析表明：独立算子的个数等于G的类数；它们可以取为$\{\hat{K}\}$；可以表为对称操作算子的函数的所有这种算子都是$\{\hat{K}\}$的线性组合，形成G的群代数的中心。另一方面，更为重要的是，群代数的元既可理解为矢量空间中的矢量，也可以理解为作用于这个空间上的线性算子，它通过乘法将每一矢量线性地变为另一个矢量。因而，在表示论中，群代数同时扮演着表示的算子（集合）和表示的空间的双重角色。这就使得有限群的表示含于群代数的结构之中。

16.2 正则表示与群代数的对称基

上面已经指出，群代数的每个元通过乘法（左乘）将一个元线性地变成另一个元，因而定义了一个作用于这个矢量空间上的线性变换。特别地，每个群元g定义了一个这样的变换

（算子）

$$\hat{g}: \hat{u} \longrightarrow \hat{u}' = \hat{g}\hat{u} \qquad (16.5)$$

这里，把算子对矢量的作用定义为前者按群代数中的乘法左乘后者。这个算子显然是线性的。由于群代数中的乘法保留了群內的乘法，由 gh 定义的算子显然是由 g 和 h 定义的算子之积。所以，(16.5)式定义了群 G 的一个 N（G 的阶）維表示，表示空间便是做为矢量空间的群代数。G 的这个特殊的表示称为它的左正则表示。类似地可以定义右正则表示。由于我们只使用左正则表示，以下简称为正则表示。

容易写出正则表示在自然基下的矩阵形式。设群元 g 的矩阵为 $A(g)$，则有

$$\hat{g}\hat{s} = \sum_{h \in G} \hat{h} A_{hs}(g) = \sum_{h \in G} \hat{h} \delta_{h, gs}$$

其中 $\hat{s}$，$\hat{h}$ 是作为基矢的群元，$\hat{g}$ 是作为算子的群元；第一个等号是 $A(g)$ 的定义；第二个等号表示在矢量 $\hat{g}\hat{s}$ 向自然基 $\{\hat{h}\}$ 展开的展开式中，只含 $\hat{h} = \hat{g}\hat{s}$ 一项，因 $\hat{g}\hat{s}$ 本身也是一个自然基矢且独立于其它自然基矢。从而到得

$$A_{hs}(g) = \delta_{h, gs} \qquad (16.6)$$

这就是有限群正则表示的矩阵形式。(16.6)式表明，群元 g 的矩阵的每列当中只有一个元素为 1，其余元素都是零；而指标为 s 的列中等于 1 的元素位于指标为 gs 的行上。可见，由群的乘法立即可写出正则表示的矩阵。例如，C_{3v} 的正则表示是 6 維的。当自然基按次序

$$I, \ C_3, \ C_3^2, \ \sigma_v^{(1)}, \ \sigma_v^{(2)}, \ \sigma_v^{(3)}$$

排列时，正则表示的矩阵可写为

$$A(I) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad A(C_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A(C_3^2)=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&1\\0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\end{pmatrix}\qquad A(\sigma_v^{(1)})=\begin{pmatrix}0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1\\1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\end{pmatrix}$$

$$A(\sigma_v^{(2)})=\begin{pmatrix}0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1\\0&0&0&1&0&0\\0&0&1&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\end{pmatrix}\qquad A(\sigma_v^{(3)})=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&1\\0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\end{pmatrix}$$

正则表示的具体形式也可在非自然基下写出。下面将在群代数中引入另一种特殊基，使得正则表示在此基下的矩阵是完全约化的，即这种基分组张成群G的不可约子空间。由于它们分组按G的不可约表示变换，即在群元的左乘作用下具有特定的变换性质，也称为对称基（不可约基）。

在群代数中取一批特殊元

$$\begin{cases}\hat{p}_{n,m}^{(i)}=\sum\limits_{g\in G}A_{n,m}^{(i)}(g^{-1})\hat{g}\\ i=1,2,\cdots,r;\quad n,m=1,2,\cdots,n_i\end{cases}\tag{16.7}$$

其中r表群的不可约表示个数，n_i为第i个不可约表示的維数，$A_{n,m}^{(i)}$为第i个不可约的标准矩阵的阵元。以每个阵元为系数来组合自然基，得到一个元$\hat{p}$，(16.7)式中共有$\sum\limits_{i=1}^{r}n_i^2$个不同的元。我们来证明，这些元构成群代数的一组基。

首先，在下节中将证明，不可约表示的阵元做为群元的函数是相互正交的。因而式(16.7)中的组合系数作为N个数的数组是线性无关的。由此推知，所得的$\sum\limits_{i=1}^{r}n_i^2$个元$\hat{p}$也是线性无关的。其次，还需证明，这个无关组还是完全（极大）的，即群代数中的任意元都可表为它们的线性组合。按完全可约性定

理，正则表示总可以约化为不可约表示的直和形式，即正则表示空间的基矢总可取为按群的不可约表示变换的矢量。如果能够证明每个这样的矢量都是(16.7)式的线性组合，也就证明了群代数的任意元都是式(16.7)的线性组合。下面就来证明这一点。

设$\hat{s}_l^{(i)}$是按群的第 i 个不可约表示的第 l 列变换的任一元，它对自然基的展开式为

$$\hat{s}_l^{(i)}=\sum_{g\in G}c_{il}(g)\hat{g}$$

则有

$$\hat{h}^{-1}\hat{s}_l^{(i)}=\sum_{g\in G}c_{il}(g)\hat{h}^{-1}\hat{g}=\sum_{g'\in G}c_{il}(hg')\hat{g}',\quad h\in G$$

$$\hat{h}^{-1}\hat{s}_l^{(i)}=\sum_{l'}A_{l'l}^{(i)}(h^{-1})\hat{s}_{l'}^{(i)}=\sum_{l',g'}c_{il'}(g')A_{l'l}^{(i)}(h^{-1})\hat{g}'$$

在以上两式中每个$\hat{g}'$的系数必须对应相等

$$c_{il}(hg')=\sum_{l'}c_{il'}(g')A_{l'l}^{(i)}(h^{-1})$$

在上式中令$g'=e$便得到$\hat{s}_l^{(i)}$的系数公式

$$c_{il}(g)=\sum_{l'}c_{il'}(e)A_{l'l}^{(i)}(g^{-1}),\ g\in G$$

代回$\hat{s}_l^{(i)}$的展开式，交换对 g 和 l' 的求和次序，并注意定义式(16.7)，最后得到

$$\hat{s}_l^{(i)}=\sum_{l'}c_{il'}(e)\hat{p}_{l'l}^{(i)} \tag{16.8}$$

这就是所要证明的。总之，以上证明了(16.7)式定义的所有元构成群代数的一组基。

下面再来证明，这组基恰为对称基，即它们在群元的左乘作用下分组按G的不可约表示变换。设 h 是 G 的任意元，则有

$$\hat{h}\hat{p}_{nm}^{(i)}=\sum_{g\in G}A_{nm}^{(i)}(g^{-1})\hat{h}\hat{g}=\sum_{s\in G}A_{nm}^{(i)}(s^{-1}h)\hat{s}$$

$$=\sum_{s\in G}\sum_{l}A_{nl}^{(i)}(s^{-1})A_{lm}^{(i)}(h)s$$
$$=\sum_{l}A_{lm}^{(i)}(h)\sum_{s}A_{nl}^{(i)}(s^{-1})s$$

此即

$$hp_{nm}^{(i)}=\sum_{l}A_{lm}^{(i)}(h)p_{nl}^{(i)},\ h\in G \qquad (16.9)$$

可见，$p_{1m}^{(i)}$，$p_{2m}^{(i)}$，…，$p_{n_i m}^{(i)}$都按第 i 个不可约表示的第 m 列变换。所以，在对称基下，正则表示将被约化为 $\sum_{i=1}^{r}n_i$ 个不可约表示的直和，其中 G 的全部不可约表示都将出现，而且每个表示的重复度正好等于其维数。

例如，C_{3v} 的群代数的对称基为

$$\begin{cases}p^{(1)}=I+C_3+C_3^2+\sigma_v^{(1)}+\sigma_v^{(2)}+\sigma_v^{(3)}\\ p^{(2)}=I+C_3+C_3^2-\sigma_v^{(1)}-\sigma_v^{(2)}-\sigma_v^{(3)}\\ p_{11}^{(3)}=I-\frac{1}{2}C_3-\frac{1}{2}C_3^2-\frac{1}{2}\sigma_v^{(1)}-\frac{1}{2}\sigma_v^{(2)}+\sigma_v^{(3)}\\ p_{12}^{(3)}=\frac{\sqrt{3}}{2}C_3-\frac{\sqrt{3}}{2}C_3^2-\frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_v^{(1)}+\frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_v^{(2)}\\ p_{21}^{(3)}=-\frac{\sqrt{3}}{2}C_3+\frac{\sqrt{3}}{2}C_3^2-\frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_v^{(1)}+\frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_v^{(2)}\\ p_{22}^{(3)}=I-\frac{1}{2}C_3-\frac{1}{2}C_3^2+\frac{1}{2}\sigma_v^{(1)}+\frac{1}{2}\sigma_v^{(2)}-\sigma_v^{(3)}\end{cases} \qquad (16.10)$$

其中用到的 C_{3v} 的不可约表示的阵元由§15中的（15.15）和(15.20)式与§11.1中的例1给出。$p^{(1)}$ 张成按 $A^{(1)}$变换的不可约子空间，$p^{(2)}$张成按$A^{(2)}$变换的不可约子空间，$\{p_{11}^{(3)},p_{12}^{(3)}\}$和$\{p_{21}^{(3)},p_{22}^{(3)}\}$则张成按$A^{(3)}$变换的（二維）不可约子空间。所以，在$C_{3v}$的正则表示中$A^{(1)}$，$A^{(2)}$和$A^{(3)}$的重复度分别为１，１和２，恰为它们的維数。在对称基下，正则表示的矩阵化为

$$A(C_3)=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}&0&0\\0&0&\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}&0&0\\0&0&0&0&-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\0&0&0&0&\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$A(\sigma_v^{(3)})=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0&0\\0&-1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\0&0&0&-1&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&-1\end{pmatrix}$$

可见是完全约化的。

由群代数的对称基可以组合成其中心的标准基

$$p^{(i)}=\sum_n p_{nn}^{(i)},\quad i=1,2,\cdots,r \tag{16.11}$$

这样定义的$p^{(i)}$显然是中心内的元。将(16.7)式代入后可得

$$p^{(i)}=\sum_{g\in G}\mathrm{t_r}A^{(i)}(g^{-1})g$$

注意矩阵的迹在相似变换下不变

$$\begin{aligned}\mathrm{t_r}A^{(i)}(sg^{-1}s^{-1})&=\mathrm{t_r}[A^{(i)}(s)A^{(i)}(g^{-1})A^{(i)}(s^{-1})]\\&=\mathrm{t_r}A^{(i)}(g^{-1})\end{aligned}$$

所以$\mathrm{t_r}A^{(i)}(g^{-1})$是$G$的类函数

$$\mathrm{t_r}A^{(i)}(g^{-1})=\mathrm{t_r}A^{(i)}(K^{-1}),\quad g\in K$$

其中K是G的一个类，当g跑遍类K时，g^{-1}将跑遍G的另一个类，后者已被记作K^{-1}($K^{-1}=K$的类称为自逆的)。如将$p^{(i)}$中的求和次序写为先对同一类中的元求和再对不同类中的元求

和，则可得

$$p^{(i)}=\sum_{K}\mathrm{t}_r A^{(i)}(K^{-1})\hat{K} \qquad (16.12)$$

可见 $p^{(i)}$ 是中心内的元。而这 r 个元显然是线性无关的。以下证明它们在中心中也是完备的。设

$$\hat{w}=\sum_{inm} c_{inm}\hat{p}_{nm}^{(i)}$$

是中心内的任一元，则有

$$\hat{w}=\sum_{h\in G}\hat{h}\hat{w}\hat{h}^{-1}/N(G)$$

代入前一式，并注意用证明(16.9)式的类似方法可得

$$\hat{h}\hat{p}_{nm}^{(i)}\hat{h}^{-1}=\sum_{ll'}A_{lm}^{(i)}(h)A_{nl'}^{(i)}(h^{-1})\hat{p}_{ll'}^{(i)}$$

又利用将在下节中给出的正交关系

$$\sum_{h\in G}A_{lm}^{(i)}(h)A_{nl'}^{(i)}(h^{-1})=\sum_{h\in G}A_{lm}^{(i)}(h)A_{l'n}^{(i)}(h)^{*}$$

$$=\frac{N(G)}{n_i}\cdot\delta_{ll'}\delta_{nm}$$

最后可得

$$\hat{w}=\sum_{inm}c_{inm}\sum_{ll'}\frac{1}{n_i}\delta_{ll'}\delta_{nm}\cdot\hat{p}_{ll'}^{(i)}$$

$$=\sum_{inl}\frac{1}{n_i}c_{inn}\hat{p}_{ll}^{(i)}=\sum_{i}\left(\frac{1}{n_i}\sum_{n}C_{inn}\right)\sum_{l}\hat{p}_{ll}^{(i)}$$

即

$$\hat{w}=\sum_{i=1}^{r}c_i\hat{p}^{(i)} \qquad (16.13)$$

所以，$p^{(1)}$，$p^{(2)}$，……，$p^{(r)}$ 确为中心的一组基，可称为标准基。(16.12)式给出了由自然基到标准基的变换。

16.3 关于表示的个数和维数的定理　群代数的结构

上面关于群代数及其中心的对称基和标准基的讨论，蕴含着有限群表示论中的两条重要结论（定理）。对群代数的中

心，我们引用了两种基：自然基与标准基，前者的个数等于群的类数，后者的个数等于群的不可约表示的个数；但这两个数必须相等，都等于中心的維数。这便是关于有限群不可约表示的个数的定理：

有限群不可约表示的个数等于群的类的个数。

对于代数群，我们也引用了两种基：自然基与对称基，前者的个数等于群的阶，后者的个数等于 $\sum_{i=1}^{r} n_i^2$；这两个数也必须相等，都等于群代数的維数，即有

$$n_1^2+n_2^2+\cdots+n_r^2=N(G) \tag{16.14}$$

这就是关于有限群不可约表示的維数的定理，即：有限群的所有不可约表示的維数的平方和等于群的阶。

联合使用这两条定理，不但可以确定有限群的不可约表示的个数，而且对于阶数不太大的群也容易计算其不可约表示的維数。例如，C_{3v} 有三个类，所以只有三个不可约表示。设它们的維数分别为n_1，n_2、和 n_3，则由(16.14)式有（假定$n_1\leqslant n_2\leqslant n_3$）

$$n_1^2+n_2^2+n_3^2=6$$

不难看出，唯一的整数解为

$$n_1=n_2=1,\ \ n_3=2$$

可见 C_{3v} 的三个不可约表示中有两个一維的一个二維的。这与已知的事实相符。再如，4 次置換群 S_4 是 24 阶的，共有 5 个类。所以，S_4有 5 个不可约表示。设其維数分别为 $n_1\leqslant n_2\leqslant n_3\leqslant n_4\leqslant n_5$，则有

$$n_1^2+n_2^2+n_3^2+n_4^2+n_5^2=24$$

不难求得其唯一解为

$$n_1=n_2=1,\ \ n_2=2,\ \ n_3=n_4=3$$

由此得知：S_4有两个 1 維的，一个 2 維，两个 3 維的不可约表

示。

对于阶数不太高的有限群，用上述方法确定了其不可约表示的个数和維数之后，就可以用较为简便的办法进一步计算它们的矩阵。具体例子将在后面推导晶体点群的不可约表示时给出。

前面的分析还蕴含着关于群代数结构的结论。通过引入对称基，我们证明了，群代数做为正则表示的表示空间，是由下列不可约子空间的直和构成的：n_1个n_1維的等价子空间，n_2个n_2維的等价子空间，…，n_r个n_r維等价子空间，r是群的类数亦即不可约表示的个数。这些子空间既然在群元的左乘下不变，它们自然也在群代数的任意元的操作下不变，因而也可说是群代数的左不变子空间。不可约性意味着，这些子空间不再具有左不变的眞子空间。总之，这些子空间是群代数的最小左不变子空间（最小左理想）。子空间的（左）不变性，包含了群代数的乘法在其中的封闭性。所以群代数的（左）不变子空间必为子代数。

利用(16.9)式和关于不可约表示矩阵元的正交性定理，不难进一步导出群代数的对称基的乘积公式

$$p^{(i)}_{kl}p^{(j)}_{nm}=\delta_{ij}\delta_{km}p^{(i)}_{nl}\cdot\frac{N(G)}{n_i} \qquad (16.15)$$

注意，由于乘法运算的双线性性，群代数内的乘法将完全由其基的乘积公式规定，因而从根本上说，基的乘积公式规定着群代数的结构。由式(16.15)可以看出，对每个i，由$\{p^{(i)}_{nm}: n,m=1,2,\cdots,n_i\}$张成的子空间不但是左不变的，而且也是右不变的，因而是双侧不变的。但在这些子空间内不存在双侧不变的眞子空间。设有某一双侧不变的非零子空间存在，则其中至少含一个基$p^{(i)}_{nm}$，如$p^{(i)}_{11}$；则(16.15)式表明，左不变性要求，此空间必含有$p^{(i)}_{1l}$，右不变性将进一步导致还必须含有$p^{(i)}_{nl}$的结

果。因而这个子空间与原子空间重合。所以，上面所说的双侧不变子空间$\{p_{nm}^{(i)}:\ n,m=1,2,\cdots,n_i\}$乃是群代数的最小双侧不变子空间。

(16.15)式中的因子δ_{ij}还表明，这些双侧不变子空间是相互“零化”的 即每一子空间中的元左乘或右乘其它子空间时，都将那些子空间变为零空间$\{0\}$。

综上所述，可以不依赖于群表示的概念，来直接陈述群代数的结构：群代数由数目等于群的类数的最小双侧不变子空间（最小双侧理想）的直和构成；它们是相互零化的，而且每个又可分解为n_i个互相等价的n_i維最小左不变子空间（最小左理想）的直和。

当我们尚不知道群的不可约表示时，并不能具体作出群代数的对称基(16.7)；但关于群代数结构的上述定理仍然是成立的。如果能够找到一种办法来实现群代数的上述分解，就在原则上作出了群的全部不可约表示。因为这正是它作为正则表示空间的完全约化。在以后推导置换群的表示时，我们将利用这一点。

对于群代数的中心（可称为类代数），其中的乘法可由自然基的乘法公式

$$\hat{K}_i\hat{K}_j=\sum_{k=1}^{r}C_{ijk}\hat{K}_k,\quad 或\hat{I}\hat{J}=\sum_{K}C_{IJK}\hat{K} \qquad (16.16)$$

来规定。此式也称为类的乘法公式。其中，“结构常数”C_{ijk}容易由群的乘法来写出，例如，对C_{3v}有

$$
\begin{array}{llll}
K_1K_1=K_1 & & & \\
K_1K_2=K_2 & & & \\
K_1K_3=K_3 & C_{1jk}=\delta_{jk} & & \\
K_2K_2=2K_1+K_2 & C_{221}=2 & C_{222}=1 & C_{223}=0 \\
K_2K_3=2K_3 & C_{231}=0 & C_{232}=0 & C_{233}=2
\end{array}
$$

$$K_3K_3=3K_1+3K_2 \quad C_{331}=3 \quad C_{332}=3 \quad C_{333}=0$$

由于中心是可易代数，系数C_{ijk}对于前两个脚标是对称的

$$C_{ijk}=C_{jik} \tag{16.17}$$

如取中心的标准基(16.11)，则由(16.15)式可得乘积公式

$$p^{(i)}p^{(j)}=\delta_{ij}p^{(i)}\cdot\frac{N(G)}{n_i} \tag{16.18}$$

由此可见，在标准基下中心内的乘法最为简单：任二元之积的系数等于二者的对应系数之积再乘以$N(G)/n_i$。即有

$$\hat{w}=\hat{u}\hat{v}\Longleftrightarrow w_i=u_iv_iN(G)/n_i$$

(16.18) 式表明，群代数的中心可表为数目等于群的类数的一維双側不变子空间的直和，这些子空间是互相零化的。也可以说，中心为数目等于群的类数的一維子代数的直和。实现中心的这种分解与作出其标准基是一回事，因为每个一維子代数恰由一个标准基矢张成。

§17 特征标与正交性定理

17.1 特征标

在处理某些问题时，并不需要知道表示的所有矩阵元，而只需知道这些矩阵的迹。每个n阶矩阵有n^2个阵元，但只有一个迹（对角元素之和），可见用后者要比用前者简便得多。另一方面，由于表示矩阵的迹包含着关于表示本身性质的重要信息，它自然地成为研究群表示论的一个簡便而有效的工具。下面将看到，用这个概念可以使关于群表示的一些性质的论证大为簡化。

群表示矩阵$A(g)$的迹

$$\chi(g)=\sum_i A_{ii}(g)=\mathrm{t_r}A(g),\quad g\in G \tag{17.1}$$

称为表示A的特征标，它是群元的函数。如果A是可约的，则特征标称为是复合的；如果A是不可约的，则其特征标称为是单纯的。由于群的不可约表示的特征标（完整系）完全由群本身的结构来决定，因而也可以说是群的单纯特征标。

由定义(17.1)立即可以看出特征标具有以下性质：

1° 等价表示的特征标相同

$$t_r(S^{-1}A(g)S)=t_r(A(g)SS^{-1})=t_rA(g)$$

这一性质表明，特征标是等价表示的共同特征，即是整个等价表示类的特征。

2° 特征标是类函数

$$t_rA(hgh^{-1})=t_r[A(h)A(g)A^{-1}(h)]=t_rA(g)$$

即它对于属于同一个共轭类中的元素取相等的值。可写为

$$\chi(g)=\chi(K),\quad K\text{是含有}\,g\,\text{的类}$$

3° $A=\sum_i a_i A^{(i)}\Rightarrow\chi(g)=\sum_i a_i\chi^{(i)}(g)$

即复合特征标为单纯特征标的组合，组合系数恰为各不可约表示在可约表示中的重复度。在此用到

$$t_r(A\oplus B)=t_rA+t_rB$$

4° $\chi^*(g)=\chi(g^{-1})$

这是由于，有限群的任何表示都有等价的幺正表示，而对于幺正表示有

$$A(g^{-1})=A^{-1}(g)=A^+(g)=\tilde{A}^*(g)\Rightarrow$$

$$t_rA(g^{-1})=t_r\tilde{A}^*(g)=t_rA^*(g)=[t_rA(g)]^*$$

5° 特征标在单位元处的值等于表示的维数。即有

$$\chi(e)=n=t_rI$$

为了得到特征标进一步的性质，须利用不可约表示矩阵元的正交性。

17.2 不可约表示矩阵元的正交完备性

不可约表示的矩阵元做为群上的函数，按如下定义的内

积，是两两正交的

$$(f,\varphi)=\sum_{g\in G}f(g)\varphi^*(g) \qquad (17.2)$$

即有如下的正交关系

$$(A^{(i)}_{km},A^{(j)}_{ln})=\sum_{g\in G}A^{(i)}_{km}(g)A^{(j)*}_{ln}(g)$$

$$=\frac{N(G)}{n_i}\delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{mn} \qquad (17.3)$$

其中 n_i 是第 i 个不可约表示$A^{(i)}$的維数，$N(G)$是G的阶，表示的矩阵都已取为幺正的。

正交性定理(17.3)包含以下三点內容：不同（不等价）的表示的矩阵元是正交的；同一个表示的不同矩阵元也是正交的；每个表示的所有矩阵元的自內积都相等，等于群的阶除以表示的維数。

这个关于不可约幺正矩阵元的重要定理，可以借助于Schur引理来证明。为此，引入矩阵

$$M=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}A^{(i)}(g)XA^{(j)}(g^{-1})$$

其中X是任意一个n_i行n_j列的矩阵。不难验证，M具有性质

$$A^{(i)}(g)M=MA^{(j)}(g),\quad g\in G$$

按Schur引理，上式蘊含

$$M=cI\cdot\delta_{ij}\quad 或\quad M_{kl}=c\delta_{ij}\delta_{kl}$$

其中 I 是n_i阶的单位方阵。现在进一步，取矩阵X为

$$X_{pq}=\delta_{pm}\delta_{qn}$$

代入M的定义式幷计算阵元，得

$$M_{kl}=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}A^{(i)}_{km}(g)A^{(j)}_{nl}(g^{-1})$$

$$=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}A^{(i)}_{km}(g)A^{(j)*}_{ln}(g)=c\delta_{ij}\delta_{kl}$$

最后为了定出常数 c ，可在上式中令$i=j$并计算t_rM

$$\sum_k M_{kk}=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}A^{(i)}_{km}(g)A^{(i)}_{nk}(g^{-1})$$

$$=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}A^{(i)}_{nm}(e)=\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}\delta_{nm}$$

$$=\delta_{nm}=cn_i$$

从而有

$$c=\delta_{nm}/n_i$$

代回上面关于M_{kl}的式子得

$$\sum_{g\in G}A^{(i)}_{km}(g)A^{(j)*}_{ln}(g)=\frac{N(G)}{n_i}\delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{mn}$$

此即(17.3)。

这里，相互正交的函数的总数应为所有不可约表示的維数的平方之和，按上节中的定理，这个和数等于群的阶。所以群的不可约表示的矩阵元形成$N(G)$个群上的正交函数。注意到N阶群上的函数的全体，即N个复数的数组的全体构成一个N維的线性空间，它与群代数的空间同构，可知上述正交函数组构成为这个空间的一组正交基。从而任意一个群上的函数$f(g)$都能表为正交函数组的线性组合

$$f(g)=\sum_{imn}f_{imn}A^{(i)}_{mn}(g),\quad g\in G \tag{17.4}$$

这表明，群的不可约表示的阵元所形成的函数组，在群上的函数空间中是完备的。

总之，群的不可约幺正表示的阵元形成群上函数空间中的一个正交完备系。

例如，C_{3v}上的任意函数实际上是由 6 个数值构成的数组，它们的全体形成一个 6 維空间。而 C_{3v} 的不可约幺正表示的矩

阵元共有6个，这6个函数的值是已知的，可列表如下

C_{3v}	I	C_3	C_3^2	$\sigma_v^{(1)}$	$\sigma_v^{(2)}$	$\sigma_v^{(3)}$
$A^{(1)}$	1	1	1	1	1	1
$A^{(2)}$	1	1	1	-1	-1	-1
$A^{(3)}_{11}$	1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1
$A^{(3)}_{12}$	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0
$A^{(3)}_{21}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0
$A^{(3)}_{22}$	1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	-1

不难验证这6个函数是两两正交的，因而形成6维空间的一组正交基，C_{3v}上的任意函数都能写成它们的线性组合。

17.3 单纯特征标的正交性关系

我们回过来继续讨论特征标的性质。利用幺正不可约表示阵元的正交性，可以证明群的所有单纯特征标也是两两正交的：

$$6^\circ \quad (\chi^{(i)}\chi^{(j)}) = \sum_{g\in G}\chi^{(i)}(g)\chi^{(j)*}(g) = N(G)\cdot\delta_{ij}$$

事实上，不可约表示总可取为幺正的，因为有限群的任意表示都有等价的幺正表示，而等价表示有相同的特征标，从而有(17.3)成立。再对等式两边取 $\sum\limits_{k=m=1}^{n_i}\ \sum\limits_{l=n=1}^{n_j}$，即得上式。注意到特征标是类函数，这个正交性公式也可改写为对群的类求和的形式（$\sum\limits_{g}=\sum\limits_{K}\sum\limits_{g\in K}$）：

$$6^{\circ\prime}\quad \sum_K\sqrt{\frac{N(K)}{N(G)}}\,\chi^{(i)}(K)\sqrt{\frac{N(K)}{N(G)}}\chi^{(j)*}(K)=\delta_{ij}$$

上式表明，“归一化的”单纯特征标$\left\{\sqrt{\frac{N(K)}{N(G)}}\chi^{(i)}(K)\right.$；

$\left.i=1,2,\cdots,r\right\}$为$r$个正交归一的类函数。但$r$是$G$的类的个数，因而也是类函数（$r$个复数的数组）空间的維数。所以，单纯特征标形成类函数空间的正交归一基。从而，任意类函数都可写为单纯特征标的线性组合：

$$7^{\circ}\quad f(K)=\sum_i\left(\sum_{K'}f(K')\sqrt{\frac{N(K')}{N(G)}}\chi^{(i)*}(K')\right)\cdot\sqrt{\frac{N(K)}{N(G)}}\chi^{(i)}(K)$$

交换上式中的求和次序，并注意$f(K)$的任意性，可见性质7°又蕴含：

$$8^{\circ}\quad \sum_i\sqrt{\frac{N(K)}{N(G)}}\chi^{(i)}(K)\sqrt{\frac{N(K')}{N(G)}}\chi^{(i)*}(K')=\delta_{KK'}$$

相对于第一正交性关系6°′，8°可称为单纯特征标的第二正交性关系。如将G的每个归一化单纯特征标的值写成一行，则将得到一个方阵：6°′表明方阵的行是正交归一的，8°表明方阵的列是正交归一的。因此，单纯特征标（归一化）的完整表形成一个幺正方阵。例如，C_{3v}的归一化单纯特征标的完整表可写为

	I	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\sqrt{\frac{N(K)}{6}}\chi^{(1)}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$\sqrt{\frac{N(K)}{6}}\chi^{(2)}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$
$\sqrt{\frac{N(K)}{6}}\chi^{(3)}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0

其中C_{3v}的类用一个代表元前面冠以类的阶来表示。此表是一个3×3的幺正方阵。利用正交性质常常可以方便地由单纯特征的完整表的部分已知值算出其另一些值。

17.4 单纯特征标的计算

在应用中，常需要知道给定群的单纯特征标的完整表（见下节）；所以单纯特征标的计算也是刻划已知群的一项基础性的工作。从原则上说，单纯特征标是由群的结构决定的，但在一般情况下并沒有一个由群的乘法表计算特征标的简便公式。

对于阶数不太高的群来说，比较简便的办法是，利用群元间的部分关系（部分乘法表）写出特征标的某些值所满足的简单方程，再由这些方程的解和部分正交性关系确定特征标完整表中的所有值。由于由群元的乘法关系或正交关系所写出的方程，对于决定特征标值来说并不都是独立的，这就存在一个选取哪些关系能使计算较为简单的问题。当群的阶不太高时，上述关系的数目也不太多，因而选取适当的关系这一小的技巧（或经验）并不困难，这时这一方法总是可行的和简便的。下面仅举一个有代表性的例子来说明。

计算点群O的单纯特征标。这个群由使立方体复原的一切转动操作组成，含有六个2次轴，四个3次轴，三个4次轴，24个操作。如果用一个代表元及前面冠以类的阶来标记各个

类，则O的五个类可写为I，$6C_2$，$8C_3$，$6C_4$，$3C_4^2$。首先确定O的单纯特征标的个数和維数。显然个数为5；而維数可由

$$n_1^2+n_2^2+n_3^2+n_4^2+n_5^2=24$$

解出，为

$$n_1=n_2=1,\quad n_3=2,\quad n_4=n_5=3$$

（实际上：$O\cong S_4$）。其中一个一維表示是已知的单位表示。由性质5°知，各特征标在第一个类处的值等于表示的維数。所以特征标表中的第一行和第一列总是知道的，并不需要计算。现在先计算另一个一維表示。计算一維特征标的方便之处在于，群元的乘法关系直接表现于特征标的值之间。例如

$$C_2^2=I\Rightarrow[\chi^{(2)}(C_2)]^2=\chi^{(2)}(I)=1\Rightarrow\chi^{(2)}(C_2)=\pm1$$

$$C_3^3=I\Rightarrow[\chi^{(2)}(C_3)]^3=\chi^{(2)}(I)=1\Rightarrow\chi^{(2)}(C_3)=1,e^{\pm2\pi i/3}$$

$$C_4^2C_3=C_3'\Rightarrow\chi^{(2)}(C_4^2)\chi^{(2)}(C_3)=\chi^{(2)}(C_3)\Rightarrow\chi^{(2)}(C_4^2)$$

$$=[\chi^{(2)}(C_4)]^2=1$$

又由$\chi^{(2)}$与$\chi^{(1)}$的正交性有

$$1+6\chi^{(2)}(C_2)+8\chi^{(2)}(C_3)+6\chi^{(2)}(C_4)+3=0$$

从而必须

$$\chi^{(2)}(C_3)=1,\quad \chi^{(2)}(C_2)=-1,\quad \chi^{(2)}(C_4)=-1$$

这就确定了第二个一維特征标。二維特征标的计算可如下进行：由二維特征标$\chi^{(3)}$与两个已知的特征标的正交性关系得到两个方程为

$$2+6\chi^{(3)}(C_2)+8\chi^{(3)}(C_3)+6\chi^{(3)}(C_4)+3\chi^{(3)}(C_4^2)=0$$

$$2-6\chi^{(3)}(C_2)+8\chi^{(3)}(C_3)-6\chi^{(3)}(C_4)+3\chi^{(3)}(C_4^2)=0$$

将两式相加、减得

$$\begin{cases}2+8\chi^{(3)}(C_3)+3\chi^{(3)}(C_4^2)=0\\ \chi^{(3)}(C_2)+\chi^{(3)}(C_4)=0\end{cases}$$

或

$$\begin{cases} \chi^{(3)}(C_3)=-\frac{1}{4}-\frac{3}{8}\chi^{(3)}(C_4^2) \\ \chi^{(3)}(C_4)=-\chi^{(3)}(C_2) \end{cases}$$

代入$\chi^{(3)}$的自内积公式，有

$$4+6[\chi^{(3)}(C_2)]^2+8[\chi^{(3)}(C_3)]^2+6[\chi^{(3)}(C_4)]^2 +3[\chi^{(3)}(C_4^2)]^2=24$$

得

$$12[\chi^{(3)}(C_2)]^2+\frac{1}{2}\left[1+\frac{3}{2}\chi^{(3)}(C_4^2)\right]^2+3[\chi^{(3)}(C_4^2)]^2=20$$

又，可以直接证明，其平方等于单位矩阵的2阶方阵的迹只能取0，±2三个值。从而有

$$C_2^2=I\Rightarrow\chi^{(3)}(C_2)=0,\ \pm2$$

$$C_4^4=I\Rightarrow\chi^{(3)}(C_4^2)=0,\ \pm2$$

但为了满足前面的方程，$\chi^{(3)}(C_2)$只能取一个值0，而$\chi^{(3)}(C_4^2)$必须取值2。由此又定出$\chi^{(3)}$的另两个数

$$\chi^{(3)}(C_3)=-1,\ \chi^{(3)}(C_4)=0$$

最后计算三維特征标。由于已经知道了三个特征标的値，用待定的特征标与它们的正交关系可以得到三个方程，再加上自内积公式，共四个方程，足以确定所求特征标的四个待定値。由前面两个正交关系的方程可得

$$3+8\chi(C_3)+3\chi(C_4^2)=0$$

$$\chi(C_2)+\chi(C_4)=0$$

由第三个正交关系的方程得

$$3-4\chi(C_3)+3\chi(C_4^2)=0$$

从而得

$$\begin{cases} \chi(C_3)=0,\ \chi(C_4^2)=-1 \\ \chi(C_4)=-\chi(C_2) \end{cases}$$

由χ的自内积公式又有

$$9+12[\chi(C_2)]^2+3=24$$

因而　$\chi(C_2)=\pm1$

这样便获得三維特征标的两组可能值。因只有两个三維单纯特征标，故这两组值正好给出了$\chi^{(4)}$和$\chi^{(5)}$。将以上结果稍加整理，便可写出点群O的单纯特征标的完整表

O	I	$6C_2$	$8C_3$	$6C_4$	$3C_4^2$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	−1	1	−1	1
$\chi^{(3)}$	2	0	−1	0	2
$\chi^{(4)}$	3	−1	0	1	−1
$\chi^{(5)}$	3	1	0	−1	−1

当一个群可以分解为两个较简单的群的直积时，它的单纯特征标可由两个因子群的单纯特征标的乘积给出。这是因为，直积群的不可约表示完全由因子群的不可约表示的直积给出；而直积矩阵的迹等于因子矩阵的迹的乘积，即

$$t_r(A\otimes B)=(t_rA)(trB)$$

例如点群$O_h=O\otimes C_i$的特征标便可由O和C_i的已知单纯特征表直接写出

O_h	I	$6C_2$	$8C_3$	$6C_4$	$3C_4^2$	i	$6iC_2$	$8iC_3$	$6iC_4$	$3iC_4^2$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
$\chi^{(3)}$	1	−1	1	−1	1	1	−1	1	−1	1
$\chi^{(4)}$	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1
$\chi^{(5)}$	2	0	−1	0	2	2	0	−1	0	2
$\chi^{(6)}$	2	0	−1	0	2	−2	0	1	0	−2
$\chi^{(7)}$	3	−1	0	1	−1	3	−1	0	1	−1
$\chi^{(8)}$	3	−1	0	1	−1	−3	1	0	−1	1

$\chi^{(9)}$	3	1	0	-1	-1	3	1	0	-1	-1
$\chi^{(10)}$	3	1	0	-1	-1	-3	-1	0	1	1

注意，直积群的类由因子群的类的乘积给出。

用上面的方法，不难作出所有有限点群的单纯特征标的完整表。

由特征标的定义(17.1)和性质2°、4°，可将(16.12)式改写为

$$p^{(i)}=\sum_{K}\chi^{(i)*}(K)\hat{K} \tag{17.5}$$

或再利用性质8°，将上式改写为

$$\hat{K}=\sum_{i}\frac{N(K)}{N(G)}\chi^{(i)}(K)p^{(i)} \tag{17.6}$$

式(17.5)表明：由群代数中心的自然基到标准基的变换系数即为群的单纯特征标（复数共轭）。这说明群代数的中心的结构(C_{ijk})与群的单纯特征标是相互决定的。由此可知，应当存在一组由类的乘法公式中的系数C_{ijk}决定群的单纯特征标的方程。将(17.6)代入(16.16) 并注意(16.18)可得

$$N(I)N(J)\chi^{(i)}(J)\chi^{(i)}(I)=n_i\sum_{K}C_{IJK}N(K)\chi^{(i)}(K) \tag{17.7}$$

其中I、J、K是类的符号，(i)是单纯特征标的序号，n_i是第i个特征标（表示）的维数。为了方便，可将G的类编号，并以i，j，k表示类的序号。规定单位元所组成的类序号为1，可写

$$n_i=\chi^{(i)}(e)=\chi_1^{(i)}$$

注意方程组(17.7)对每个单纯特征标都有相同的形式，因而可以去掉序号(i)。这样，任意单纯特征标χ都满足方程组

$$\begin{cases}N_iN_j\chi_i\chi_j=\chi_1\sum_{k}C_{ijk}N_k\chi_k\\ 2\leqslant i\leqslant i\end{cases} \tag{17.8}$$

其中已注意到,当$i=1$时,(17.8)式将成为恒等式($N_1=1, C_{1jk}=\delta_{jk}$),因而可去掉；又，指标 i ，j 对调时方程不变，可将这些重复的方程去掉。将方程组(17.8)与单纯特征标的自内积公式

$$\sum_i N_i \chi_i \chi_i^* = N \qquad (17.9)$$

($N=N(G)$) 联立，就足以确定所有单纯特征标的数值。例如，对于点群 C_{3v}，利用其类的乘法公式不难写出 相应的方程组(17.8)为

$$\begin{cases} 2\chi_2^2=\chi_1^2+\chi_1\chi_2 \\ \chi_2\chi_3=\chi_1\chi_3 \\ 3\chi_3^2=\chi_1^2+2\chi_1\chi_2 \end{cases}$$

相应的(17.9)为

$$\chi_1^2+2\chi_2^2+3\chi_3^2=6$$

注意維数永远是正的

$$\chi_1>0 \qquad (17.10)$$

可求得上列方程的全部（三组）解，即 C_{3v} 的三个单纯特性标（列表如下）。

C_{3v}	I	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	-1
$\chi^{(3)}$	2	-1	0

此表的归一化形式已在17.3节的末尾写出。

式(17.8)、(17.9)、(17.10) 可看作是计算已知群（因而系N_i，N，C_{ijk}都是已知的）的单纯特征标的一般方程组。但从前面的例子中可以看到，对于比较简单的群，采取非系统的简便方法，实际上更为实用。

§18 特征标理论在群表示论中的应用

18.1 表示的约化与唯一性定理

假定已经用两种不同的方法（不同的变换矩阵）将表示$A(g)$约化

$$S^{-1}A(g)S=\sum_i a_i A^{(i)}(g)$$

$$Q^{-1}A(g)Q=\sum_i a_i' B^{(i)}(g), \quad B^{(i)}\sim A^{(i)}$$

则由特征标的性质1°和3°有

$$\chi(g)=\sum_i a_i \chi^{(i)}(g)$$

$$\chi(g)=\sum_i a_i' \chi^{(i)}(g)$$

再利用性质6°，可解出

$$a_i'=a_i=\frac{1}{N(G)}(\chi,\chi^{(i)})$$

这就证明了在§12中已经指出的关于约化的唯一性定理。任意表示中所含的各个等价的不可约成分的个数是唯一确定的，与分解（约化）的方法无关。

这里同时给出了计算任意表示中各不可约成份的重复度的公式

$$A=\sum_i a_i A^{(i)} \qquad ((12.13))$$

$$\chi=\sum a_i \chi^{(i)} \qquad (18.1)$$

$$a_i=\frac{1}{N(G)}(\chi,\chi^{(i)}) \qquad (18.2)$$

当给定一个表示时，很容易算出其特征标，而群的单纯特征标通常是已知的，故由(18.2)式可很快地算出系数a_i，从而确定了已给表示的构造(12.13)。在实际运用时，有时容易直接看

出分解式(18.1)，这样可以更快地得到系数 a，而不必计算内积(18.2)。

例如，我们考虑11.1节的例 2 中给出的S_3的那个三維表示的约化。首先，已经知道S_3的单纯特征标（注意$S_3\cong C_{3v}$）为

S_3	(1)	2(123)	3(12)
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	-1
$\chi^{(3)}$	2	-1	0

而所给表示的特征标容易由其定义写出。按定义有

$$\begin{cases}\hat{A}((12))\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{a}_2\\ \hat{A}((12))\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{a}_1\\ \hat{A}((12))\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{a}_3\end{cases}\qquad \begin{cases}\hat{A}((123))\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{a}_2\\ \hat{A}((123))\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{a}_3\\ \hat{A}((123))\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{a}_1\end{cases}$$

可见

$$\chi((12))=1\qquad \chi((123))=0$$

当然还有$\chi((1))=3$。将这个特征标与S_3的单纯特征标表比较，不难看出

$$\chi=\chi^{(1)}+\chi^{(3)}$$

从而知($a_1=1$，$a_2=0$，$a_3=1$)

$$A=A^{(1)}+A^{(3)}$$

即所给的S_3的三維表示可分解为S_3的单位表示和二維不可约表示。这与12.1节中的例 2 所得的结果相同。

再如，考虑任意有限群的正则表示的分解问题。由(16.6)式即可写出正则表示的特征标

$$\chi(g)=N\cdot\delta_{g e}$$

从而

$$a_i=\frac{1}{N}(\chi,\chi^{(i)})=\chi^{(i)*}(e)=n_i$$

可见在正则表示中所有不可约表示都会出现，且重复度分别等于各自的維数。卽有

$$A_{正则}=\sum_i n_i A^{(i)}$$

$$\chi_{正则}(g)=\sum_i n_i \chi^{(i)}(g)$$

在上式中取 $g=e$，又得

$$N=\sum_i n_i^2$$

此郎(16.14)式。这些结论都是§16中的已知结果，这里是用特征标理论将它们重新导出。

18.2 表示的等价性判据

判断一个群的两个表示是否等价，最直接的办法自然是从定义(11.6)或(11.9)出发，证明是否有例如滿足(11.9)式的矩阵 S 存在。这显然是比较麻烦和困难的，因而需要有一种简单可行的判据。由特征标性质1°知道，两个表示如彼此等价，它们的特征标必相等。反之，如果两个表示的特征标相等，则它们彼此等价。注意这一点并非自明的，它与群的性质相关；因为迹相等的矩阵不一定彼此相似，况且(11.9)式中的变换矩阵 S 还要求与 g 无关。在上一段中已经表明，若两个表示的特征标相等，则它们等价于对应等价的一些不可约表示的直和。而对应等价的表示的直和必然彼此等价

$$\begin{cases}A'=S^{-1}AS\\ B'=P^{-1}BP\end{cases}\Rightarrow A'\oplus B'=(S\oplus P)^{-1}(A\oplus B)(S\oplus P)$$

注意矩阵直和的运算公式 $(A\oplus B)(C\oplus D)=AC\oplus BD$，其中 A 与 C 是同阶的，B 与 D 是同阶的。所以上述的两个直和表示必是彼此等价的。从而原来的两个表示彼此等价。

总之，特征标理论提供了以下判据：

两个表示彼此等价的充要条件是它们的特征标相等。

例如，前面所说明的 S_3 的三維表示(11.1节的例 2），将

S_3的元换为C_{3v}的同构对应元后，便成为C_{3v}的一个表示。C_{3v}的这个表示的特征标为

$$\chi(I)=3,\ \chi(C_3)=0,\ \chi(\sigma_v)=1$$

又由C_{3v}的自然表示的已知形式，可看出其特征标也取上面的值。从而得知，C_{3v}的以上两个表示是等价的。

18.3 表示的可约性判据

从前面的讨论中不难看出，一个表示的可约性信息完全含于其特征标当中。由特征标的性质3°和6°可得（注意$a_i^*=a_i$）

$$(\chi,\chi)=N(G)\cdot\sum_i a_i^2\geqslant N(G) \qquad (18.3)$$

由于a_i都是非负整数，上式右端的等号只有当某个a_i等于1而其余的全为零时才能成立。而这一情形意味着以χ为特征标的表示是不可约的。从而有如下判据：

一个表示是不可约的充要条件是其特征标的自内积等于群的阶，即

$$(\chi,\chi)=N(G) \qquad (18.4)$$

例如，要判断前面多次提到的S_3的三維表示的可约性，只须计算其特征标的自内积

$$(\chi,\chi)=3^2+2\times0^2+3\times1^2=12>6$$

再如，对于由S_3的上述表示导出的二維表示，即在二維不变子空间$[\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_3]$中的缩小，显然有

$$\chi((1))=2,\ \chi((123))=-1,\ \chi((12))=0$$

$$(\chi,\chi)=2^2+2\times(-1)^2+3\times0^2=6$$

可见这个二維表示是不可约的。实际上，这个特征标等于S_3的二維单纯特征标$\chi^{(3)}$。所以所说的二維表示等价于S_3的二維不可约表示$A^{(3)}$。

18.4 关于直积群的不可约表示的构造

在14.3节中，我们已经得到了：直积群的全部不可约表示可由因子群的不可约表示的直积来构成，这一重要结论。在有

限群的情形，这个结果可以用特征标理论给出一个非常简捷的证明。

设$G=G_1\times G_2$，G_1和G_2的类数分别为r_1和r_2，则G的类数为$r=r_1\times r_2$。若A_1和A_2分别是G_1和G_2的不可约表示，则由二者的直积$A_1\otimes A_2$所构成的G的表示也是不可约的。事实上$A_1(g_1)\otimes A_2(g_2)$的特征标为($\mathrm{t_r}(A_1\otimes A_2)=\mathrm{t_r}A_1\cdot \mathrm{t_r}A_2$)

$$\chi(g_1g_2)=\chi_1(g_1)\chi_2(g_2) \qquad (18.5)$$

从而

$$\begin{aligned}(\chi,\chi)&=\sum_{g_1g_2\in G}\chi(g_1g_2)\chi^*(g_1g_2)\\&=\sum_{g_1\in G_1,g_2\in G_2}\chi_1(g_1)\chi_2(g_2)\chi_1^*(g_1)\chi_2^*(g_2)\\&=\sum_{g_1\in G_1}\chi_1(g_1)\chi_1^*(g_1)\cdot\sum_{g_2\in G_2}\chi_2(g_2)\chi_2^*(g_2)\\&=N(G_1)\cdot N(G_2)=N(G)\end{aligned}$$

此即(18.4)式。这就证明了G的表示$A_1\otimes A_2$的不可约性。再则，G的所有不可约表示都能这样构成。因为G_1有r_1个不可约表示，G_2有r_2个不可约表示，所以由它们的直积构成的G的不可约表示有$r_1\times r_2$个。而由(18.5)式不难看出，G的这$r_1\times r_2$个表示是互不等价的。但G的互不等价的不可约表示只有$r=r_1\times r_2$个；所以G的任意不可约表示必须等价于$r_1\times r_2$个表示中的某一表示。亦即：$r_1\times r_2$个$A_1\otimes A_2$将穷尽G的所有（不等价的）不可约表示。

18.5 单纯特征标的Wigner和

在考虑体系状态的时间反演简并性时，需要用到一种判据，它可以由这些状态据以变换的表示的特征标的 Wigner 和$\sum_{g\in G}\chi(g^2)$给出。下面将证明，对于单纯特征标，这个和只能取三个可能值：0，$\pm N(G)$，同时将找到取各个值的条件。

当单纯特征标为非实的时

$$\chi(g)\neq\chi^*(g)$$

则相应的不可约表示$A(g)$与其复共轭表示$A^*(g)$是不等价的。由正交性定理知，$A(g)$的元与$A^*(g)$的元是正交的，有

$$\sum_g A_{ij}(g)[A^*_{hl}(g)]^*=\sum_g A_{hj}(g)A_{hi}(g)=0$$

从而

$$\sum_g \chi(g^2)=\sum_g \mathrm{t_r}[A(g)A(g)]=\sum_{ij}\sum_g A_{ij}(g)A_{ji}(g)=0$$

当单纯特征标为实的（即所有值都为实数）时

$$\chi(g)=\chi^*(g)$$

则相应的不可约表示与其复共轭表示等价

$$A(g)\sim A^*(g)$$

我们已取A（从而A^*）为幺正的，因而有幺正矩阵S，使

$$A(g)=SA^*(g)S^{-1},\quad g\in G \tag{18.6}$$

从而有

$$\sum_g \chi(g^2)=\sum_g \mathrm{t_r}[A(g)A(g)]=\sum_g \mathrm{t_r}[A(g)SA^*(g)S^{-1}]$$

$$=\sum_{ijhl}\sum_g A_{ij}(g)S_{jh}A^*_{hl}(g)S^{-1}_{li}$$

$$=\sum_{ijhl}\frac{N(G)}{n}\delta_{ih}\delta_{jl}S_{jh}S^{-1}_{li}$$

$$=\frac{N(G)}{n}\sum_{ij}S_{ji}\cdot S^{-1}_{ji}$$

此即

$$\sum_g \chi(g^2)=\frac{N(G)}{n}\mathrm{t_r}(\tilde{S}S^{-1}) \tag{18.7}$$

其中n是表示A的維数，也是S的阶数。为了算出(18.7)式中的迹，进一步考虑变换矩阵S的性质。取(18.6)式的复共轭，再代回原式得

$$A(g)SS^*=SS^*A(g),\quad g\in G \tag{18.8}$$

由Schur引理，上式蕴含

$$SS^{*}=cI \tag{18.9}$$

现在利用S的幺正性($S^{+}=\tilde{S}^{*}=S^{-1}$)，上式又可写为

$$\tilde{S}=cS \tag{18.10}$$

将上式两边作转置再代回原式又有

$$c^{2}=1\Rightarrow c=\pm 1 \tag{18.11}$$

将(18.11)和(18.10)式代入(18.7)式中的迹便得

$$t_{r}(\tilde{S}S^{-1})=\pm t_{r}(SS^{-1})=\pm t_{r}I=\pm n$$

从而

$$\sum_{g}\chi(g^{2})=\pm N(G) \tag{18.12}$$

总之，单纯特征标的Wigner和为

$$\sum_{g}\chi(g^{2})=\begin{cases}0 & ，当\chi\neq\chi^{*}\\ N(G) & ，当\chi=\chi^{*}而\tilde{S}=S\\ -N(G) & ，当\chi=\chi^{*}而\tilde{S}=-S\end{cases} \tag{18.13}$$

其中S是把与χ相应的表示变为其复共轭表示的相似变换矩阵。

一个不可约表示A是否等价于实表示，可以由其特征标的Wigner和判定。实际上，(18.13)式的三种情形分别对应于下面三种情况：

(a) 表示A与其复共轭表示A^{*}不等价（自然不能等价于实表示）；

(b) 表示A与其复共轭表示A^{*}等价，且等价于实表示；

(c) 表示A与其复共轭表示A^{*}等价，但不等价于实表示。

情况(a)和(b)、(c)的前半命题都是显然的，需要证明的只是(b)和(c)的后半命题。先来证明(b)的后半命题。为此，只须证明在(18.13)式的第二种情形下，存在通过相似变换将$A(g)$变为实矩阵的变换矩阵。

首先，(18.6)式中的幺正矩阵S总可写为

$$S=e^{iK} \tag{18.14}$$

其中K是与S同阶的厄米矩阵

$$K^{+}=K \tag{18.15}$$

其次，由于在（18.13）式的第二种情形下S又是对称的$(\tilde{S}=S)$，因而要求(18.14)式中的K也是对称的

$$\tilde{K}=K \tag{18.16}$$

由式(18.15)和(18.16)可见，K必须为实的

$$K^{*}=K \tag{18.17}$$

这样可将(18.6)式写为

$$A^{*}(g)=e^{-iK}A(g)e^{iK},\quad g\in G \tag{18.18}$$

现在取$e^{iK/2}$为实变换矩阵，将A变为等价表示B

$$B(g)=e^{-iK/2}A(g)e^{iK/2},\quad g\in G \tag{18.19}$$

则由(18.17)、(18.18)和(18.19)式得知，B为实表示

$$B^{*}(g)=e^{iK/2}A^{*}(g)e^{-iK/2}=e^{-iK/2}A(g)e^{iK/2}=B(g)$$

再来证明情况(c)的后半命题。若有非奇异方阵P存在，通过它可将A变为等价的实表示，则有

$$(P^{-1}AP)^{*}=(P^{-1})^{*}A^{*}P^{*}=(P^{-1})^{*}S^{-1}ASP^{*}=P^{-1}AP$$

从而又有

$$A(g)SP^{*}P^{-1}=SP^{*}P^{-1}A(g),\quad g\in G \tag{18.20}$$

按Schur引理，上式蕴含

$$SP^{*}P^{-1}=cI \tag{18.21}$$

或

$$S=cP(P^{*})^{-1} \tag{18.22}$$

取其复共轭

$$S^{*}=c^{*}P^{*}P^{-1} \tag{18.23}$$

从而可得

$$S^{*}S=|c|^{2}\cdot I \tag{18.24}$$

但在(18.13)式的第三种情形下($\tilde{S}=-S$)有

$$S^*S=-I \tag{18.25}$$

这与(18.24)式矛盾。因而这种情形下不可能存在具有如上性质的P矩阵，即A不能等价于实表示。

上面的结果表明：一个不可约表示有等价实表示的充要条件是其特征标的Wigner和($\sum_g \chi(g^2)$)等于群的阶。

§19 晶体点群的单纯特征标与不可约表示

19.1 晶体点群的同构关系

群的单纯特征标和不可约表示是由群的抽象结构(乘法表)决定的。因而同构的群具有相同的单纯特征标和不可约表示。不难证明，32个晶体点群除平凡的C_1外，都同构于以下7个基础点群或它们的直积

$$C_2,\ C_3,\ C_4,\ D_3,\ D_4,\ T,\ O$$

所以，为了得到所有晶体点群的单纯特征标与不可约表示，只需要对这7个点群进行计算。我们先来建立上述同构关系。

$$\begin{aligned}C_6&=\{I,C_6,C_6^2,C_6^3,C_6^4,C_6^5\}\\&=\{I,C_6^2,C_6^4\}\cup C_6^3\{I,C_6^2,C_6^4\}\\&=C_3\cup C_6^3C_3=C_3\times\{I,C_6^3\}\end{aligned}$$

又，点群C_6的二阶子群$\{I,C_6^3\}$与点群C_2同构，所以可写

$$C_6=C_3\times\{I,C_6^3\}\cong C_3\times C_2 \tag{19.1}$$

同理有

$$D_2=C_2\times\{I,C_2^{(1)}\}\cong C_2\times C_2 \tag{19.2}$$

$$D_6=D_3\times\{I,C_6^3\}\cong D_3\times C_2 \tag{19.3}$$

在上面的写法中，已经表明了群元的同构对应关系。例如在(19.3)中，群D_6的元C_6^3的对应元是群C_2的元C_2。

对于第二类点群，我们有

$$C_{nh}=C_n\cup\sigma_h C_n \tag{19.4}$$

$$C_{nv}=C_n\cup\sigma_v C_n \tag{19.5}$$

$$C_{ni}=C_n\cup iC_n \quad (n=\text{奇数}) \tag{19.6}$$

$$S_{2n}=C_n\cup S_{2n}C_n \quad (n=\text{偶数}) \tag{19.7}$$

$$D_{nh}=D_n\cup\sigma_h D_n \tag{19.8}$$

$$D_{nd}=D_n\cup\sigma_d D_n \tag{19.9}$$

$$T_h=T\cup\sigma_h T=T\cup iT \tag{19.10}$$

$$T_d=T\cup\sigma_d T \tag{19.11}$$

$$O_h=O\cup\sigma_h O=O\cup iO \tag{19.12}$$

注意(19.4)式中的σ_h与群C_n的元可易，从而可将C_{nh}分解为子群C_n和$\{I,\sigma_h\}$的直积。有同构关系

$$\begin{cases}C_{nh}=C_n\times\{I,\sigma_h\}\cong C_n\times C_2\\ n=1,2,3,4,6\end{cases} \tag{19.13}$$

同理由(19.6)、(19.8)、(19.10)和(19.12)可得

$$\begin{cases}C_{ni}=C_n\times\{I,i\}\cong C_n\times C_2\\ n=1,3\end{cases} \tag{19.14}$$

$$\begin{cases}D_{nh}=D_n\times\{I,\sigma_h\}\cong D_n\times C_2\\ n=2,3,4,6\end{cases} \tag{19.15}$$

$$T_h=T\times\{I,i\}\cong T\times C_2 \tag{19.16}$$

$$O_h=O\times\{I,i\}\cong O\times C_2 \tag{19.17}$$

(19.5)式中的$\sigma_v C_n$可写为$iC_2^{(1)}C_n$，其中$C_2^{(1)}$是绕垂直于n次轴的一个2次轴转π角的转动。显然，$C_2^{(1)}C_n$由n个转π角的操作组成，转轴都垂直于n次轴且均匀分布。这n个操作正是D_n中不含于子群C_n内的绕n个2次轴的转动，可记为

$$C_2^{(1)}C_n=D_n-C_n$$

从而(19.5)式可写为

$$C_{nv}=C_n\cup i(D_n-C_n)$$

注意 i 与其它元可易，且$i^2=I$，可知C_{nv}和 D_n 之间的下列对应是同构的：子群C_n的每个元与自身对应；$i(D_n-C_n)$ 内的每个元对应于去掉 i 后的(D_n-C_n)中的元。于是有

$$\begin{cases} C_{nv}=C_n\cup i(D_n-C_n)\cong C_n\cup(D_n-C_n)=D_n \\ n=2,3,4,6 \end{cases} \tag{19.18}$$

类似的由(19.7)和(19.11)式可得

$$S_4=C_2\cup i(C_4-C_2)\cong C_2\cup(C_4-C_2)=C_4 \tag{19.19}$$

$$T_d=T\cup i(O-T)\cong T\cup(O-T)=O \tag{19.20}$$

对于(19.9)式，n 为奇数和偶数两种情况有所不同，通过类似的分析可得

$$D_{2d}=D_2\cup i(D_4-D_2)\cong D_2\cup(D_4-D_2)=D_4 \tag{19.21}$$

$$D_{3d}=D_3\cup iD_3=D_3\times\{I,i\}=D_3\times C_2 \tag{19.22}$$

统观式(19.1)、(19.2)、(19.3)—(19.22)，我们已经得到了32个晶体点群与 7 个基础点群或其直积之间的同构关系。因而由 7 个基础点群的特征标和表示，通过上述已知的同构关系，立即可写出其余晶体点群的特征标和表示。

19.2 七个基础点群的单纯特征标与不可约表示

点群 C_2、C_3、C_4 都是循环群，其表示（即特征标）可由15.1节的结果直接写出，这与17.4节中所示方法是一致的。有

C_2	I	C_2
$\chi^{(1)}$	1	1
$\chi^{(2)}$	1	-1

C_3	I	C_3	C_3^2
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	$e^{2\pi i/3}$	$e^{4\pi i/3}$
$\chi^{(3)}$	1	$e^{4\pi i/3}$	$e^{2\pi i/3}$

C_4	I	C_4	C_4^2	C_4^3
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	i	-1	$-i$
$\chi^{(3)}$	1	-1	1	-1
$\chi^{(4)}$	1	$-i$	-1	i

点群$D_3 \cong C_{3v}$的表示已在15.3节中作出，两个一維表示即特征标，二維特征标可由已知的二維表示写出。更简便的办法是采取17.4节中的方法先作出其特征标表，再设法写出一个二維不可约表示。

D_3的一个二維表示可以这样得到：在D_3的操作下，垂直于三次轴的平面（过D_3的中心点）是不变的，因而形成一个二維不变子空间。在这个平面上引入适当的坐标轴，则容易写出D_3的每个操作在这个平面上的坐标变换矩阵，从而得到D_3的一个二維表示。写出这个表示的特征标，容易验证它是不可约的。结果如下

D_3	I	$2C_3$	$3C_2$
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	-1
$\chi^{(3)}$	2	-1	0

$$A^{(3)}(C_2)=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A^{(3)}(C_3)=\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

对点群D_4可以作完全类似的处理，因为它只有一个二維的不可约表示（$A^{(5)}$），其余四个不可约表示都是一維的。结果为

D_4	I	C_4^2	$2C_4$	$2C_2$	$2C_{24}$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	1	-1	-1
$\chi^{(3)}$	1	1	-1	1	-1
$\chi^{(4)}$	1	1	-1	-1	1
$\chi^{(5)}$	2	-2	0	0	0

$$A^{(5)}(C_2)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$A^{(5)}(C_4)=\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

点群T的不可约表示有四个，三个一维的，一个三維的$(1^2+1^2+1^2+3^2=12=N(T))$。先用17.4节中的方法算出其特征表，再作出其自然表示，由这个表示的特征标可验证它是不可约的。所以T的自然表示便是它（唯一）的三維不可约表示。结果为

T	I	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	$e^{2\pi i/3}$	$e^{4\pi i/3}$	1
$\chi^{(3)}$	1	$e^{4\pi i/3}$	$e^{2\pi i/3}$	1
$\chi^{(4)}$	3	0	0	-1

$$A^{(4)}(C_2)=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\quad A^{(4)}(C_3)=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

点群O的不可约表示有五个，两个一維的，一个二維的，两个三維的。其特征标表已经在17.4节中给出，现在只需作出它的一个二維表示和两个三維表示。为了得到二維表示，我们来考虑由群O到其一个子群上的同态映射。

首先，这种同态的核必须是O的一个正规（不变）子群。显然$N=\{I, 3C_4^2\}$是O的一个子群，又它由O的两个完整的类

$\{I\}$和$\{3C_4^2\}$构成，因而是不变子群。O的以N为核的同态象是商群O/N，其阶数为$24/4=6$。O相对N的陪集分解可由O的一个与N不相交的6阶子群来生成。在O的轴系中，任一3次轴都垂直于三个2次轴；而一个3次轴和与之垂直的三个2次轴恰为点群D_3的轴系，因而相应的6个操作便形成O的满足上述条件的子群D_3。于是有

$$D_3=\{I,C_2',C_2'',C_2''',C_3,C_3^2\}$$

$$O/N=\{N,C_2'N,C_2''N,C_2'''N,C_3N,C_3^2N\}$$

可见（C_2',C_2'',C_2'''分表绕三个不同的2次轴的转动）

$$gN\to g,\quad g\in D_3 \tag{19.23}$$

定义了一个由群O到子群D_3上的4对1的同态映射。从而，D_3的每个不可约表示，通过(19.23)式也给出O的一个不可约表示。特别地，由D_3的二维表示可得到O的二维表示。O的生成元可取为C_3和C_2，其中C_2的轴与C_3的轴是相邻的，并有（见(2.27)式）

$$C_2=C_4^2C_2'C_4^{-2} \tag{19.24}$$

从而O的二维表示$A^{(3)}$可写为

$$A^{(3)}(C_2)=A^{(3)}(C_4^2)A^{(3)}(C_2')A^{(3)}(C_4^{-2})$$

但由式(19.23)知，$A^{(3)}(C_4^2)$应为单位矩阵，而C_2'和C_3的矩阵则由D_3的二维表示确定。于是得

$$A^{(3)}(C_2)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\quad A^{(3)}(C_3)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

O的三維表示可由其自然表示得到。取O的三个4次轴为坐标轴，使生成元C_3的轴在第一象限，C_2的轴在(y,z)平面，容易写出O的各操作的矩阵。将其特征标与O的特征标对照，可知它恰为单纯特征标$\chi^{(4)}$。所以，自然表示正是三維不可约表示

$A^{(4)}$。有

$$A^{(4)}(C_2)=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix},\quad A^{(4)}(C_3)=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

再由O的特征标表可看出，有$\chi^{(5)}=\chi^{(2)}\chi^{(4)}$，因而三維表示$\chi^{(2)}A^{(4)}$的特征标恰是$\chi^{(5)}$。从而又得出另一个三維表示为

$$A^{(5)}=\chi^{(2)}A^{(4)}$$

写出生成元的矩阵

$$A^{(5)}(C_2)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix},\quad A^{(5)}(C_3)=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

以上我们具体作出了七个基础点群的单纯特征标和不可约表示的完整表（注意，一維的表示即特征标）。在此顺便指出，由于有同构关系

$$S_3\cong D_3,\quad S_4\cong O,\quad A_4\cong T \tag{19.25}$$

置换群S_3、S_4和交代群A_4的特征标和表示已被同时给出。

§20 表示空间的约化

20.1 表示（空间）的约化问题

在12.3节中我们已经讨论了将已知表示约化的含意。设在空间$\mathscr{V}$上给定了群G的一个表示，群元g所对应的作用于$\mathscr{V}$上的（线性）算子用$\hat{g}$表示（g的同态象）。我们说这个表示是已知的，即知道所有算子$\hat{g}$在一组基矢$(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$下的矩阵$A(g)$

$$\hat{g}\varphi_i=\sum_j\varphi_j A_{ji}(g) \tag{20.1}$$

对(20.1)式也可以说，是矢量组$\{\varphi_i\}$按群G的已知表示A变

换。这不过是"在空间$\mathscr{V}$上给定了群G的一个表示"一语的另一种更为具体化的表述而已。要将此表示约化，就是要将表示空间分解为关于$\{\hat{g}\}$的最小不变子空间的直和。这是一个抽象的表述；要实际上实现这一分解，则需具体作出各个子空间的基矢。所以，将表示A约化也就是要找到一组新的基，使其分组按G的不可约表示变换。以$\psi^{(i)}_{p,m}$表示按第i个不可约表示的第m列变换的基矢

$$\hat{g}\psi^{(i)}_{p,m}=\sum_{k=1}^{n_i}\psi^{(i)}_{p,k}\,A^{(i)}_{k,m}(g),\quad g\in G \tag{20.2}$$

这样的基矢可能不只1个，因而用脚标p来区分，p取值的个数等于第i个不可约表示的重复度a_i。$\psi^{(i)}_{p,m}$必须是老基的线性组合

$$\psi^{(i)}_{p,m}=\sum_j\varphi_jS_{j;ipm} \tag{20.3}$$

由(20.1)、(20.2)和(20.3)式可得

$$S^{-1}A(g)S=\sum_i\oplus a_iA^{(i)}(g),\quad g\in G \tag{20.4}$$

式常简记为

$$A=\sum_i a_iA^{(i)} \tag{(12.13)}$$

新的基(ψ)称为表示空间的对称基。这样，将表示A进行约化，可以有两种表述：作出表示空间中的对称基，或求出将A变为不可约表示矩阵的直和的变换矩阵。由(20.3)和(20.4)式可见，这两种表述是等价的，都等效于计算S矩阵的阵元。

在实际问题中，对称群G的不可约表示的矩阵$A^{(i)}(g)$都是已知的，我们的问题是在这个条件下如何将给定的表示约化。显然最直接的办法是，由(20.4)式写出S的阵元所满足的方程组，再在附加的幺正条件下求解方程。但除了简单的情况之外，求解这组方程是困难的。本节中将建立一种更为有效的方案，以避开S矩阵元的计算。其要点是利用所给表示的算子

$\hat{g}$和不可约表示的矩阵元，直接作出表示空间的对称基。

20.2 对称化算子

为了得到表示空间$\mathscr{V}$中的对称基，先来造一批$\mathscr{V}$上的算子，要求它们将$\mathscr{V}$中的矢量变为对称基（如果不是变为零）。(16.9)式表明，如将(16.7)式中的$\hat{g}$理解为表示的算子，则其中的$p_{nm}^{(i)}$便是满足上述要求的$\mathscr{V}$上的算子。因为，若

$$p_{nm}^{(i)}\psi=\psi_{nm}^{(i)}\neq 0$$

则按(16.9)式有

$$\hat{h}\psi_{nm}^{(i)}=\sum_{l}\psi_{nl}^{(i)}A_{lm}^{(i)}(h),\quad h\in G$$

可见$p_{nm}^{(i)}$将ψ变成为按第i个不可约表示的第m列变换的矢量。所以我们由$\mathscr{V}$上的表示的算子$\hat{g}$，通过(16.7)式定义了一批$\mathscr{V}$上的对称化算子$p_{nm}^{(i)}$，为了使相应的公式简洁些，在(16.7)式的右边再乘以"归一化常数"$n_i/N(G)$。即令

$$p_{nm}^{(i)}=\frac{n_i}{N(G)}\cdot\sum_{g\in G}A_{nm}^{(i)}(g^{-1})\hat{g} \qquad (20.5)$$

其中n_i是$A^{(i)}$的維数。

按完全可约性定理，表示空间$\mathscr{V}$总可分解为不可约表示空间的直和。我们又可在各个不可约子空间内取基，使等价的不可约表示有相同的矩阵。这样的基矢便构成$\mathscr{V}$中的一组对称基。对称基的选取显然不是唯一的。事实上，如果$\{\psi_{pm}^{(i)}\}$是对称基，则

$$\varphi_{qm}^{(i)}=\sum_{p=1}^{a_i}c_{pq}^{(i)}\psi_{pm}^{(i)}$$

也构成一组对称基，其中$c^{(i)}=(c_{pq}^{(i)})$是满方阵，与指标m无关。在我们的问题中，对称基是未知的，现在是要利用由(20.5)式所定义的p算子来生成一组对称基。为此，首先要明确p算子的一些重要性质。

考虑p算子对任一组对称基矢的作用

$$p_{nm}^{(i)}\psi_{pk}^{(j)}=\frac{n_i}{N}\sum_g A_{nm}^{(i)}(g^{-1})\hat{g}\psi_{pk}^{(j)}=\frac{n_i}{N}\sum_g A_{mn}^{(i)*}(g)\sum_l \psi_{pl}^{(j)}A_{lk}^{(j)}(g)$$

$$=\sum_l \psi_{pl}^{(j)}\frac{n_i}{N}\sum_g A_{lk}^{(j)}(g)A_{mn}^{(i)*}(g)=\sum_l \psi_{pl}^{(j)}\cdot\delta_{ij}\cdot\delta_{lm}\cdot\delta_{kn}$$

所以有

$$p_{nm}^{(i)}\psi_{pk}^{(j)}=\delta_{ij}\cdot\delta_{nk}\cdot\psi_{pm}^{(i)} \tag{20.6}$$

特别地

$$p_{nm}^{(i)}\psi_{pn}^{(i)}=\psi_{pm}^{(i)} \tag{20.7}$$

上式表明，只要知道每个不可约子空间（由 i 、 p 标志）中的一个对称基矢，便可通过 p 算子的作用式(20.7)生成其余的全部对称基矢。例如，由 $\psi_{p1}^{(i)}$ 出发便可得到

$$\begin{cases}\psi_{pm}^{(i)}=p_{1m}^{(i)}\psi_{p1}^{(i)}\\ m=2,3,\cdots,n_i\end{cases} \tag{20.8}$$

这样就将问题简化为如何确定所有 $\psi_{p1}^{(i)}$。

设 ψ 是 $\mathscr{V}$ 中的任意矢量，则可写为

$$\psi=\sum_{jpk}c_{jpk}\cdot\psi_{pk}^{(j)} \tag{20.9}$$

利用(20.6)得

$$p_{mm}^{(i)}\psi=\sum_p c_{ipm}\psi_{pm}^{(i)} \tag{20.10}$$

显然，$p_{mm}^{(i)}\psi$ 在 $\hat{g}$ 作用下将按 $A^{(i)}$ 的第 m 列变换。(20.10)式还表明，$p_{mm}^{(i)}$ 的作用是由 $\mathscr{V}$ 向由 $\psi_{1m}^{(i)}$、$\psi_{2m}^{(i)}$、…、$\psi_{a_i m}^{(i)}$ 所张成的子空间 $\mathscr{V}_m^{(i)}$ 的投影；因为它将所有的 ψ 都变为其在 $\mathscr{V}_m^{(i)}$ 中的分量。所以 $p_{mm}^{(i)}$ 也称为投影算子。为了作出按 $A^{(i)}$ 的第一列变换的对称基矢 $\varphi_1^{(i)}$，只需用投影算子 $p_{11}^{(i)}$

$$\varphi_1^{(i)}=p_{11}^{(i)}\psi=\sum_p c_{ip1}\psi_{p1}^{(i)} \tag{20.11}$$

上式表明，通过调整组合系数 c，亦即调整矢量 ψ，可由 $p_{11}^{(i)}$ 的作用生成 a_i 个（$\mathscr{V}_1^{(i)}$ 的維数）线性独立的 $\varphi_{p1}^{(i)}$：$\varphi_{11}^{(i)}$，$\varphi_{21}^{(i)}$，…，

$\varphi^{(i)}_{a_i 1}$。这a_i个$\varphi^{(i)}_{p1}$正是我们所需作出的。注意(20.8)式所表明的结果对于对称基$\{\varphi^{(i)}_{pm}\}$也是成立的；因为在前面的讨论中只是假定$\{\psi^{(i)}_{pm}\}$为任意一组对称基。所以，将这a_i个$\varphi^{(i)}_{p1}$(对每个i)代入

$$\begin{cases}\varphi^{(i)}_{pm}=p^{(i)}_{1m}\varphi^{(i)}_{p1}\\ m=2,3,\cdots,n_i\end{cases} \tag{20.12}$$

便生成$\mathscr{V}$的一组对称基。这样作出的表示空间的分解当然不是唯一的，因为由式(20.11)产生的a_i个独立矢量组不是唯一的。

由(20.6)式所表示的对称化算子的基本性质也可以用这些算子本身的乘法公式来表达。由(20.6)和(20.9)式可以得到一个比(20.10)式更一般些的公式

$$p^{(i)}_{nm}\psi=\sum_p c_{ipn}\psi^{(i)}_{pm} \tag{20.13}$$

由此可知

$$\hat{g}p^{(i)}_{nm}\psi=\sum_l A^{(i)}_{lm}p^{(i)}_{nl}\psi$$

注意到上式中的ψ是$\mathscr{V}$中的任意矢量，便得算子等式

$$\hat{g}p^{(i)}_{nm}=\sum_l A^{(i)}_{lm}(g)p^{(i)}_{nl} \tag{20.14}$$

即$p^{(i)}_{nm}$在$\hat{g}$的左乘下与$\psi^{(i)}_{pm}$在$\hat{g}$的作用下有相同的变换公式。由此，对照(20.6)式又得

$$p^{(i)}_{nm}p^{(j)}_{lk}=\delta_{ij}\delta_{nk}p^{(i)}_{lm} \tag{20.15}$$

事实上，注意到$\hat{g}$是g的同态象，§16中对式(16.9)和(16.15)的推导对于对称化算子(20.5)也是适用的。因而能直接写出上面两个公式。此外，当表示为幺正的时，容易由(20.5)得出

$$p^{(i)+}_{nm}=p^{(i)}_{mn} \tag{20.16}$$

由公式(20.15)的特别情形

$$p^{(i)}_{nm}p^{(i)}_{ln}=p^{(i)}_{lm} \tag{20.17}$$

$$p^{(i)}_{1m}p^{(i)}_{11}=p^{(i)}_{1m} \tag{20.18}$$

和式(20.11)及(20.12)可见，用对称化算子导出$\mathscr{V}$中的对称基

的公式可以更简洁地写为

$$\varphi_{pm}^{(i)}=p_{1m}^{(i)}\psi_{ip} \qquad (20.19)$$

其中 ψ_{ip} 是在 $\mathscr{V}$ 中选出的矢量，使得对每个 i，a_i 个矢量 $\{p_{11}^{(i)}\psi_{ip}\}$ 是线性独立的。

20.3 对称基的建立

在(20.19)式中只使用了第一个下标为1的对称化算子，这是为了叙述的明确性，并非是必须的。由前面的讨论过程不难看出，(20.19)式也可由下式代替

$$\varphi_{pm}^{(i)}=p_{lm}^{(i)}\psi_{is} \qquad (20.20)$$

其中的指标 l 是可以任取的，甚至可以对同一个 m 有 n 个不同的 l 值，只要使得对某一个 m_0，矢量组 $\{p_{lm_0}^{(i)}\psi_{is}\}$ 是线性无关的，因为其中 i 和 m_0 是确定的，而 (l,s) 取 a_i 组不同值，p 可看作是 (l,s) 取值的次序编号。这一灵活性允许我们在建立无关组 $\{p_{lm_0}^{(i)}\psi_{is}\}$ 时对 m_0 和 l 的取值作适当的选择，以简化计算。例如，可取 i_0 和 m_0 使 $A^{(i)}(g)$ 的第 l_0 行 m_0 列上的元素尽可能多地为零，从而 $p_{lm_0}^{(i)}$ 比较简单，便于在 $\mathscr{V}$ 中选取 ψ_{is}。无关组则可这样确定：取 $\mathscr{V}$ 中的一个 ψ_{i1} 使

$$p_{l_0m_0}^{(i)}\psi_{i1}\neq 0$$

之后，改变 l_0 值，如能得到 a_i 个独立矢量 $p_{lm_0}^{(i)}\psi_{i1}$ 即得所找的无关组；如所得独立矢量的数目不足 a_i，则需在 $\mathscr{V}$ 内另取一 $\psi_{i2}^{(i)}$，使 $p_{l_0m0}^{(i)}\psi_{i2}$ 独立于由 ψ_{i1} 所生成的无关组，再改变 l_0 的值，…，直到生成数目等于 a_i 的无关矢量组 $\{p_{lm_0}^{(i)}\psi_{is}\}$ 为止。而 a_i 可由

$$a_i=\frac{1}{N(G)}(\chi,\chi^{(i)}) \qquad ((18.2))$$

确定，χ 是已知表示的特征标。

考虑前面讨论过的置换群 S_3 的一个三維表示。用本节的符

号，$\hat{s}=\hat{A}(s)$，$s\in S_3$，表示空间由三个无关矢量张成，$\mathscr{V}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3]$，$\hat{s}$的定义为

$$\hat{s}\boldsymbol{a}_i=\boldsymbol{a}_{s(i)} \qquad (i=1,2,3) \tag{20.21}$$

在 18.1 节中已给出了这个表示的特征标χ和S_3的单纯特征标表，为便于比较，重列如下：

S_3	(1)	2(123)	3(12)
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	-1
$\chi^{(3)}$	2	-1	0
χ	3	0	1

可见有

$$\chi=\chi^{(1)}+\chi^{(3)}$$

从而三个不可约成分的出现次数分别为

$$a_1=1,\ a_2=0,\ a_3=1$$

S_3的不可约表示矩阵已在前面给出((15.15)和(15.20))。令

$s_1=(1)$，$s_2=(123)$，$s_3=(132)$，$s_4=(12)$，$s_5=(23)$，$s_6=(31)$

容易写出S_3的全部对称化算子：

$$\begin{cases} p_{11}^{(1)}=\dfrac{1}{6}(\hat{s}_1+\hat{s}_2+\hat{s}_3+\hat{s}_4+\hat{s}_5+\hat{s}_6) \\ p_{11}^{(2)}=\dfrac{1}{6}(\hat{s}_1+\hat{s}_2+\hat{s}_3-\hat{s}_4-\hat{s}_5-\hat{s}_6) \\ p_{11}^{(3)}=\dfrac{1}{3}\left(\hat{s}_1-\dfrac{1}{2}\hat{s}_2-\dfrac{1}{2}\hat{s}_3+\hat{s}_4-\dfrac{1}{2}\hat{s}_5-\dfrac{1}{2}\hat{s}_6\right) \\ p_{12}^{(3)}=\dfrac{1}{3}\left(\dfrac{\sqrt{3}}{2}\hat{s}_2-\dfrac{\sqrt{3}}{2}\hat{s}_3-\dfrac{\sqrt{3}}{2}\hat{s}_5+\dfrac{\sqrt{3}}{2}\hat{s}_6\right) \end{cases} \tag{20.22}$$

$$\begin{cases} p_{21}^{(3)}=\frac{1}{3}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{s}_2+\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{s}_3-\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{s}_5+\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{s}_6\right) \\ p_{22}^{(3)}=\frac{1}{3}\left(\hat{s}_1-\frac{1}{2}\hat{s}_2-\frac{1}{2}\hat{s}_3-\hat{s}_4+\frac{1}{2}\hat{s}_5+\frac{1}{2}\hat{s}_6\right) \end{cases}$$

为了约化空间 $[\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_3]$ ，只需用到一部分对称化算子；又 $a_i<2$，就免去了建立初始无关组的麻烦。所以，遇到的是非常简单的情形。为了得到对称基矢$\boldsymbol{a}^{(1)}$，可取$\psi=\boldsymbol{a}_1$，得

$$\boldsymbol{a}^{(1)}=p_{11}^{(1)}\boldsymbol{a}_1=\frac{1}{3}(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3) \tag{20.23}$$

为了得到$\boldsymbol{a}_1^{(3)}$和$\boldsymbol{a}_2^{(3)}$，也可取$\psi=\boldsymbol{a}_1$，得

$$\begin{cases} \boldsymbol{a}_1^{(3)}=p_{11}^{(3)}\boldsymbol{a}_1=\frac{1}{6}(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2-2\boldsymbol{a}_3) \\ \boldsymbol{a}_2^{(3)}=p_{12}^{(3)}\boldsymbol{a}_1=\frac{\sqrt{3}}{6}(-\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2) \end{cases} \tag{20.24}$$

由(20.23)和(20.24)式又可写出由原基到对称基的变换矩阵

$$S=\frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{20.25}$$

不难验证，表示(20.21)在原基下的矩阵

$$A((123))=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A((12))=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

经S变换约化为不可约表示$A^{(1)}$和$A^{(3)}$的直和

$$S^{-1}A((123))S=\left(\begin{array}{c|cc}1 & 0 & 0\\ \hline 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{array}\right)$$

$$S^{-1}A((12))S=\left(\begin{array}{c|cc}1 & 0 & 0\\ \hline 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{array}\right)$$

参 考 书 目

[1] A.W.Joshi著，王锡绂等译，物理学中的群论基础，科学出版社，1982年

[2] W.Miller著，栾德怀等译，对称性群及其应用，科学出版社，1981年

[8] Г.Я.Любарский著，数学研究所译，群论及其在物理学中的应用，科学出版社，1958年

[4] B.G.Wybourne著，冯承天等译，典型群及其在物理学上的应用，科学出版社，1982年

[5] G.Racah著，梅向明译，群论和核谱，高等教育出版社，1959年

[6] B.L.Vander Waerden著，赵展岳等译，群论与量子力学，上海科技出版社，1980年

[7] C.D.H.Chisholm著，汪汉卿等译，量子化学中的群论方法，科学出版社，1981年

[8] 山内恭彦、堀江久著，张质贤译，回转群和对称群的应用，上海科技出版社，1962年

[9] 陈金全著，群表示论的新途径，上海科技出版社，1984年

[10] 弥永昌吉、杉浦光夫著，熊全淹译，代数学，上海科技出版社，1962年

[11] B.L.Van der Waerden著，曹锡华等译，代数学(I,II)，科学出版社，1978年

[12] 武汉大学数学系编，线性代数，人民教育出版社，1977年

[13] Л.С.Понтрягин著，曹锡华译，连续群（上、下），科学出版社，1978年

[14] 岩堀长庆著，孙泽瀛译，李群论，上海科技出版社，1962年

[15] 万哲光编著，李代数，科学出版社，1978年

[16] J.P.Serre著，郝钢新译，有限群的线性表示，科学出版社，1984年

[17] B.H.Arnold著，王阿雄译，初等拓扑的直观概念，人民教育出版社，1982年

[18] 曾谨言编著，量子力学（上、下），科学出版社，1981年

[19] 李政道著，粒子物理和场论简引（上、下），科学出版社，1984年

[20] J.Callaway著，王以铭译，固体量子理论（上、下），科学出版社，1984年

[21] J.C.Slater著，宋汝安泽，原子结构的量子理论（第二卷），上海科技出版社，1983年

[22] M.E.Rose著，万乙译，角动量理论，上海科技出版社，1963年

[23] 徐光宪、黎乐民著，量子化学(基本原理和从头计算法），科学出版社，1981年

[24] W·H·吉布森、B·R·波拉德著，丁里译，基本粒子物理学中的对称性原理，高等教育出版社，1984年

[25] B.F.Bayman著，石生明译，群论及其在核谱学中的应用，上海科技出版社，1963年

[26] 唐有祺著，对称性原理（一）、（二），科学出版社，1977、1979年

[27] P.G.Puranik著，赵择卿译，群论对分子振动的应用，高等教育出版社，1983年

[28] 唐敖庆等著，配位场理论方法，科学出版社，1979年

[29] F.A.Cotton著，刘春万等译，群论在化学中的应用，科学出版社，1980年

[30] G.Burns、A.M.Glazer著，俞文海等译，固体科学中的空间群，高等教育出版社，1984年

[31] Morton Hamermesh Group Theory and Its Application to Physical Problems 1962

[32] Gerald Burns Introduction to Group Theory with Applications 1977

[33] Ernest M.Loebl Group Theory and Its Applications Vol I, II, III 1968, 1971, 1975

[34] Nathan Jacobson Basic Algebra I,II 1974,1980

[35] W.Burnside Theory of Groups of Finite Order 1955

[36] M.A.Naimark, A.I.Stern Theory of Group Repre-

sentations 1982

[37] L.V.Ovsiannikov Group Analysis of Differential Equations 1982

[38] Derek J.S.Robinson A Course in the Theory of Groups 1982

[39] C.F.Gardiner A First Course in Group Theory 1980

[40] J.P.Elliott and P.G.Dawber Symmetry in Physics Vol 1, 2 1979

[41] L.C.Biedenharn, J.D.Louck Angular Momentum in Quantum Physics Theory and Application 1981

[42] L.C.Biedenharn and J.D.Louck The R cah—Wigner Algebra in Quantum Theory 1981

[43] Volker Heine Group Theory in Quantum Mechanico 1960

[44] M.Moshinsky Group Theory and the Many—Body Problem 1968

[45] H.Bacry Lectures on Group Theory and Particle Theory 1977

[46] D.B.Lichtenberg Unitary Symmetry and Elementary Particles Second Edition 1978

[47] Moshe Carmeli Group Theory and General Relativity Representations of the Lorentz Group and Their Applications to the Gravitational Field 1977

[48] Melvin Lax Symmetry Principles in Solid State and Molecular Physics 1974

[General Information]
书名=物理学中的群论方法　（上册）
作者=况蕙孙　白铭复编著
页数=199
SS号=10977373
DX号=
出版日期=1985年12月第1版
出版社=国防科技大学出版社

封面
书名
版权
前言
目录
第一章　物理学中的对称性与对称群
1.对称性的意义与描述
1.1　几何图形的对称性
1.2　物理体系的对称性
1.3　对称交换
1.4　对称群
1.5　破缺的对称性
2.分子的对称性与分子点群
2.1　空间操作的基本类型
2.2　分子的点对称性
2.3　点操作的运算性质点群的乘法表
2.4　非线型分子与有限点群
2.5　第一类（有限）点群
2.6　第二类（有限）点群
3.晶体的对称性与晶体点群、空间群
3.1　晶格的对称操作
3.2　晶体点群
3.3　格群与布喇菲格子
3.4 晶体空间群（空间群）
4.旋转对称性与旋转群
4.1　旋转对称
4.2　旋转群的参数化
4.3　旋转群的矩阵表示

4.4　旋转矩阵的指数形式
4.5　旋转群上的不变积分
5.？换对称性与？换群
5.1　？换群
5.2　？换的轮换表示
5.3　？换的循环结构
6.相对性原理与洛？兹群
6.1　正常洛？兹变换
6.2　正常洛？兹群
6.3　全洛？兹群与推广的洛？兹群
7.幺正对称与特殊幺正群
第二章　群论基础
8.群的一般概念
8.1　抽象群
8.2 连续群
9.群的主要子集
9.1　子群
9.2　生成元
9.3　类
9.4　不变子群
9.5　群的直积
10.群的同构与同态
10.1　同构
10.2　同态
10.3　同态定理
第三章　群的表示理论
11.群的线性表示
11.1　表示的一般定义

11.2　表示的等价性
11.3　等价酉表示的存在定理
12.表示的可约性
12.1　可约表示与不可约表示
12.2　完全可约性定理
12.3　表示的约化
13.对偶表示与乘积表示
13.1　对偶表示
13.2　乘积表示
13.3　不可约表示的积乘中含有单位表示的条件
14.与群的表示可对易的算子
14.1　Schur引理
14.2　与给定表示可易的算子（矩阵）
14.3　直积群的表示
15.例子——一些简单群的表示
15.1　循环群的表示
15.2　有限可换群的表示
15.3　？换群S3与点群C3v的表示
15.4　定轴转动群SO（2）的表示
15.5　定轴转动——反映群O（2）的表示
15.8　点群D∞h=O(2)×C；的表示
第四章　有限群的表示
16.群代数与正则表示
16.1　群代数
16.2　正则表示与群代数的对称基
16.3　关于表示的个数和维数的定理群

代数的结构
17.特征标与正交性定理
17.1　特征标
17.2　不可约表示矩阵元的正交完备性
17.3　单纯特征标的正交性关系
17.4　单纯特征标的计算
18.特征标理论在群表示论中的应用
18.1　表示的约化与唯一性定理
18.2　表示的等价性判据
18.3　表示的可约性判据
18.4　关于直积群的不可约表示的构造
18.5　单纯特征标的Wigner和
19.晶体点群的单纯特征标与不可约表示
19.1　晶体点群的同构关系
19.2　七个基础点群的单纯特征标与不可约表示
20.表示空间的约化
20.1　表示（空间）的约化问题
20.2　对称化算子
20.3　对称基的建立
参考书目